

## 準周期系のシュタルクラダー

著者	松村 敦
学位授与機関	Tohoku University
学位授与番号	1510
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10097/45648">http://hdl.handle.net/10097/45648</a>

博士論文

準周期系のシュタルクラダー

松村 敦

平成 8 年

# 目次

第 1 章 序論.....	1
1 - 1 研究の背景 .....	1
(1) 一様電場下の周期系の電子状態.....	1
(2) 準結晶と準周期系.....	2
(3) 非周期系のシュタルクラダー—研究の目的—.....	3
第 2 章 準周期系とシュタルクラダー.....	5
2 - 1 1 次元準周期系 .....	5
(1) 変調ポテンシャルと位相.....	5
(2) エネルギースペクトルと容量次元.....	7
(3) ハーパーモデル .....	10
(a) 波動関数の局在—非局在転移 .....	12
(b) バンドの対称性 .....	14
(c) ミニバンド構造（特に $V < 1$ の場合） .....	15
(d) エネルギースペクトルの自己相似性（ $V = 1$ の場合） .....	18
(e) 波動関数の重心によるエネルギーの番号付けと摂動論（ $V > 1$ ） .....	19
(4) フィボナッチ格子.....	25
(a) 変調ポテンシャルの構造の位相依存性 .....	27
(b) Conway の定理とその精密化.....	29
(c) 電子状態 .....	31
2 - 2 一様電場下のモデル .....	32
(1) 周期系のシュタルクラダー .....	32

(a) 電場が弱い場合 (準古典的) .....	32
(b) 電場が強い場合 (量子的) .....	34
(2) 一様電場下の非周期系－研究の目的－ .....	35
第 3 章 数値計算.....	38
3 - 1 計算方法 .....	38
(1) 一様電場下の準周期系 (本研究のモデル) .....	38
(2) 計算の条件.....	39
3 - 2 計算結果と考察 .....	40
(1) 準周期系のシュタルクラダー .....	40
(a) エネルギー準位の平均間隔と変調関数 .....	40
(b) 2次元ワニエシュタルクラダー (2DWSL) .....	50
(c) ハミルトニアン of 解析的性質 .....	54
(2) ハーパーモデルの場合 .....	61
(a) バンドの対称性 .....	61
(b) $V < 1$ のときの物理的描像－ミニバンド描像とトンネル効果－ .....	63
(c) ほとんど孤立したバンドのシュタルクラダーの解析的性質 .....	65
(d) $V = 1$ のときのエネルギースペクトルの自己相似性.....	69
(e) 波動関数の重心と摂動論 ( $V > 1$ ) .....	74
(3) フィボナッチ格子 .....	81
(a) エネルギー準位の位相依存性 .....	81
(b) 還元エネルギースペクトル (RES) .....	84
(c) フィボナッチシュタルクラダー (FSL) .....	89
第 4 章 結論.....	97
4 - 1 本研究の結果 .....	97
(1) 準周期系一般について .....	97



(2) ハーバーモデルについて .....	98
(3) フィボナッチ格子について .....	98
(4) シュタルクラダー以外の結果 .....	99
4-2 今後の課題 .....	100
謝辞 .....	102
参考文献 .....	104

# 第 1 章 序論

本研究には二つのキーワードがある。一つは準周期系，もう一つはシュタルクラダーである。準周期系とはある種の規則を持った非周期系であり，シュタルクラダーとは一様電場下の周期系のエネルギースペクトルである。本研究は準周期系に一様電場をかけた系の研究である。この章ではこれらのキーワードに対する歴史的背景について説明し，本研究の目的を明らかにする。

## 1-1 研究の背景

### (1) 一様電場下の周期系の電子状態<sup>1)</sup>

1928 年 F.Bloch は結晶固体中の電子がエネルギーバンドを作るとして固体物理の先駆者となったが，その論文では結晶に一様電場を加えると電子が周期運動をすることが予言されている<sup>2)</sup>。この振動は現在では Bloch 振動と呼ばれているが，これが周期系に一様電場をかけた系の最初の議論であった。その後の研究で 1950 年の S.Katsura, T.Hatta and A.Morita による 1 次元 tight-binding モデルにおける厳密解<sup>3)</sup>に代表されるような成果があがり，エネルギー準位が離散的で等間隔になり，全ての波動関数が局在することなどが明らかにされた<sup>4) 5)</sup>。しかし，これらの研究は先進的過ぎた故かその後の発展はなく，Wannier による議論があるまで長い沈黙があった。1959 年から Wannier によって一様電場下の周期系の問題の広範な議論が展開された<sup>6)</sup>。Wannier はこの等間隔の離散的エネルギー準位をシュタルクラダー (Stark ladder) と名付けた。この問題について広範な議論を展開した Wannier の名を加え，ワニエシュタルクラダー (Wannier Stark ladder, 以下 WSL) と呼ぶこともある。また，一様電場によって局在し

た波動関数はワニエシュタルク局在状態（WS局在状態）と呼ばれる。

Wannier の指摘以後、その様な局在状態の存在をめぐるさまざまな議論がなされてきた<sup>7)</sup>。実験による確認を試みた研究もあり、いくつかの報告もあるがどれも明確な証拠をつかむには至っていなかった<sup>8)</sup>。WS 局在状態を観測するための条件はその状態のコヒーレント長が局在長より長いことである。しかし、実際の半導体結晶の場合にはバンド幅と格子定数はそれぞれ eV と Å のオーダーであるため、WS 局在状態を観測するために必要な電場は結晶のバンド構造を破壊するほど大きくなる。このため、実際の観測は困難であった。

ところが、最近になって微細加工技術が進歩し、人工的な半導体超格子が作成されるようになった<sup>9)</sup>。人工の半導体超格子では半導体結晶に比べてバンド幅を狭く、格子定数を長く制御することができる。このため WS 局在状態を観測するために必要な電場は小さくてすむ。WSL の明確な証拠を最初につかんだのは 1988 年の Mendez 等の実験<sup>10)</sup>であった。

## (2) 準結晶と準周期系

物性の研究を物質の構造とその物性との関係を調べることにするならば、この分野は物質の構造によって結晶に代表される周期系とアモルファスに代表される非周期系とに大きく分けることができる。それぞれの分野で今日までに多くの成果があげられてきたが、1984年になって準結晶という衝撃的な物質が発見された<sup>11)</sup>。準結晶とは結晶に特徴的な長距離秩序と、結晶には許されない回転対称性を併せ持った構造ということができる。このような構造は概念としては全く新しいもので、その構造上で発現する物性がどのような特徴を持つかということは大変興味深い問題である。

近年、良質の準結晶が得られるようになりその物性の特徴が明らかにされてきている。中でも電気伝導の振る舞いは最も特徴的である。準結晶の抵抗率は  $10^3 \sim 10^4 \mu\Omega\text{cm}$  という金属としては異常に大きな値をとる<sup>12)</sup>。最近の実験では 4.2K で  $1.43 \Omega\text{cm}$  という報告もある<sup>13)</sup>。通常の金属や合金では  $100 \mu\Omega\text{cm}$  以下、アモルファス金属でも  $500 \mu\Omega\text{cm}$  を越えるものは少なく、今までの常識では考えられないことである。また、準結晶は乱れが少ないほど抵抗率が高くなる。

金属結晶の場合には欠陥が入ると電子の散乱体が増え抵抗が上昇するが、準結晶の場合にはその逆なのである<sup>14)</sup>。

このような特異な物性を示す準結晶の構造は、準周期系という概念によって理解されてきた。準周期系とは比が無理数の二つの周期の重ね合せとして与えられる。このような系は高次元の周期構造の断面として表わされることが数学的に示されている。

準結晶の特異な物性との関連からこの準周期系の研究は盛んに行われてきた。中でも電子状態の研究では1次元系で多くの成果があげられ、エネルギースペクトルの特異連続性や、臨界的な波動関数など周期系ともランダム系とも非常に異なる性質が明らかにされてきている<sup>15)</sup>。

最近では、半導体超格子による1次元準周期系が実現され、その構造や物性が研究されつつある<sup>16)</sup>。

### (3) 非周期系のシュタルクラダー研究の目的一

準周期系はランダム系とは異なり秩序構造を持った非周期系である。このような系に一樣電場をかけた場合にはランダム系には見られない秩序が期待される。この問題に関してこれまでの研究によって明らかにされたことは、次のようなものである<sup>17) 18)</sup>。

1. 全ての状態はワニエシュタルク局在状態となる。
2. エネルギースペクトルは非一樣なシュタルクラダーとなる。

しかし、これらの事実はランダム系と準周期系を区別するようなものではなく、準周期系特有の性質は何一つ見い出されていなかった。

したがって、本研究の目的は

1. 準周期系に一樣電場をかけた系での電子状態を調べる。
2. 一樣電場下においてランダム系と準周期系との違いを明らかにする。
3. 準周期系の持つ秩序構造がシュタルクラダーに与える影響を明らかにする。

である．次の章では二つのキーワード「準周期性」及び「シュタルクラーダー」についてこれまでに分かっていた事を中心に解説し，本研究の位置付けを行う．

## 第 2 章 準周期系とシュタルクラダー

本研究の理解には準周期系とシュタルクラダーという二つの側面からのアプローチが必要となる．ここでは始めに本研究で扱ったモデルの母体である 1 次元準周期系について，その取扱いおよび重要な性質について述べる．ここではこれまでの研究で知られていた事が中心であるが，本研究によって明らかにされた新たな事実も含まれている．次に本研究のもう一つの主題であるシュタルクラダーについて，周期系と非周期系とにおける性質について紹介する．この章を通して本研究の位置付けを行い，改めて研究の目的を述べる．

### 2-1 1 次元準周期系

#### (1) 変調ポテンシャルと位相

1 次元準周期系の最も簡単なモデルは，1 次元周期系にその周期とは非整合な変調ポテンシャルを加えた系を強結合近似で扱ったものである．系のハミルトニアンは

$$H_0 = - \sum_n ( |n+1\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n+1| ) + \sum_n |n\rangle V_n \langle n| \quad (2.1)$$

のように表される．ここでは，格子点間隔と跳び移り積分をそれぞれ長さとエネルギーの単位としている．また， $|n\rangle$  は格子点  $n$  に局在するワニエ状態を表わす． $V_n$  は格子点  $n$  での変調ポテンシャルの値であり，周期 1 の周期関数  $f(x)$  を用いて

$$V_n = Vf(n\omega + \phi) \quad (2.2)$$

と表される．ここで  $V$  ,  $1/\omega$  ,  $\phi$  はそれぞれ変調ポテンシャルの振幅，周期，位相である．また，周期に含まれる  $\omega$  は無理数である．Fig. 2. 1 に 1 周期分の  $f(x)$  および，各格子点での  $V_n$  の決まり方を示した．位相変数  $\phi$  は格子と変調ポテンシャルの相対的な位置関係を与える．これは準周期系特有の変数であり，系のハミルトニアンを特徴づけるパラメタの一つとなる．ここでは，関数  $f(x)$  の周期が 1 であるため位相  $\phi$  は整数の付加定数の不定性があり，したがって， $\text{mod } 1$  で表せば十分である．

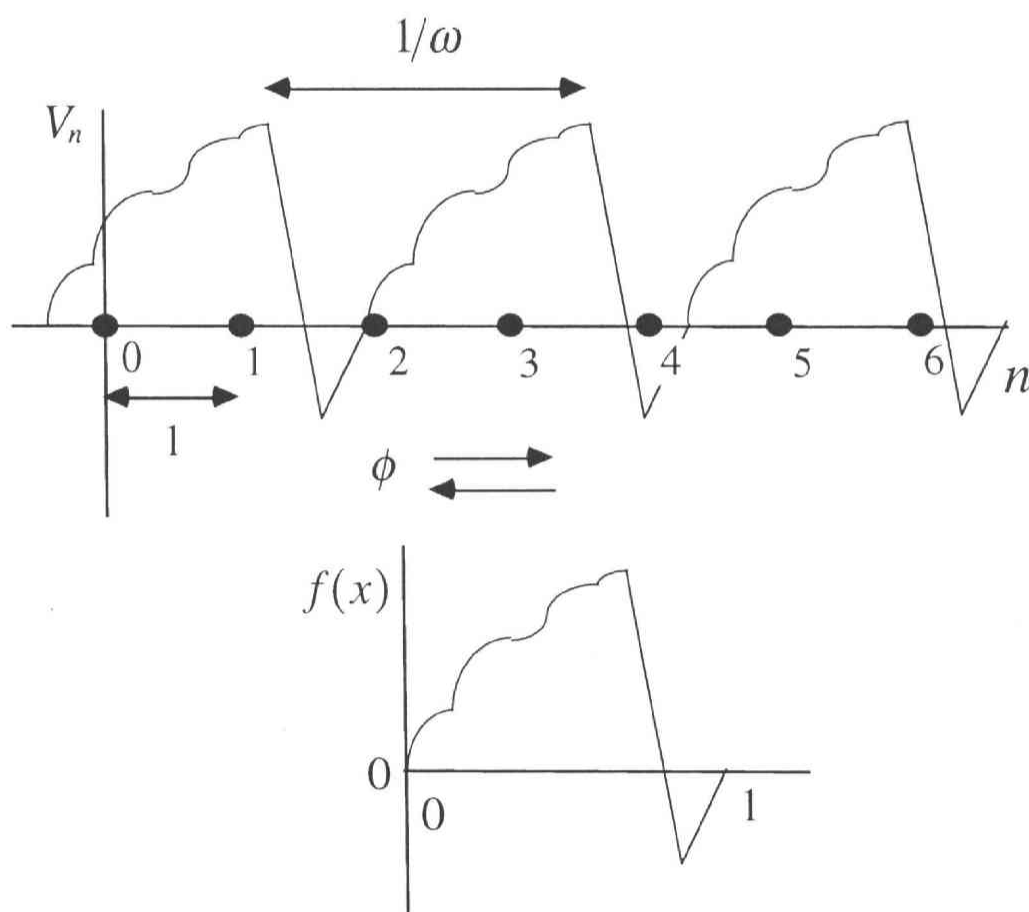


Fig. 2. 1 1次元準周期系の変調ポテンシャル  
変調ポテンシャルの周期  $1/\omega$  と格子の周期 1 が非整合になっている．

準周期系は二つの非整合な周期が重なった構造を持つ。(2.1)式の系が準周期系となるのは、変調ポテンシャルの周期  $1/\omega$  と格子の周期  $1$  が非整合になっていることに起因する。この系での格子点  $n$  の周りの局所的な環境は、局所位相  $\phi_n = n\omega + \phi \pmod{1}$  によって特定される。 $\omega$  が無理数であることから異なる二つの格子点の局所位相が  $\text{mod } 1$  で一致することはない。したがって、ある格子点を指定したときに平行移動に関して等価な格子点は存在しない。しかし、 $\phi_n$  と  $\phi_m$  の差が  $\text{mod } 1$  で十分小さければ二つの格子点  $n, m$  の環境は非常に近いものとなる。したがって、精度  $\delta\phi$  を指定したときにある格子点の環境とその精度の範囲で等価な環境を持った格子点は無数に探し出すことができ、それらは密度  $\delta\phi$ 、平均間隔  $1/\delta\phi$  で一様に分布する。このことから、準周期系の多くの性質は位相変数  $\phi$  によらないことが結論される。

ここで、準周期系が位相に陽に依存するハミルトニアンの関係式を示しておく。ハミルトニアンは位相依存性を考慮にいれて、(2.1)式のハミルトニアンを  $H_0(\phi)$  と書くことにする。このときハミルトニアンが満たす関係式は平行移動演算子  $U = \sum_n |n+1\rangle\langle n|$  を用いて

$$H_0(\phi+1) = H_0(\phi) \quad (2.3)$$

$$U^{-1}H_0(\phi)U = H_0(\phi+\omega) \quad (2.4)$$

と表わされる。(2.3)式は変調ポテンシャルが位相に関して周期  $1$  であることから導かれる。また、(2.4)式は格子点からその右隣の格子点に移動すると位相が  $\omega$  だけ進むことを表わす。

この関係は特に電場をかけた場合の理解に非常に重要になる関係式である。

## (2) エネルギースペクトルと容量次元

準周期系のエネルギースペクトルは一般にカントールセット（完全不連結集合）となる。カントールセットとは、

- i) 各点が集積点である。すなわち孤立点を持たない。
- ii) 有限長の区間は部分集合となり得ない。



という性質を満たす集合である．言いかえると，いたるところにギャップが入り込んだ構造を持っているということである．

このような 1 次元点集合をここでは広義の fractal と呼ぶことにする．広義の fractal は数学的には容量次元の値によって分類できる．容量次元  $D$  は定義式

$$D = -\lim_{b \rightarrow 0} (\ln M / \ln b) \quad (2.5)$$

で与えられる． $b$  は考えている点集合を含む区間を等間隔の区間に区切った時の区間の長さで， $M = M(b)$  はその点集合に属する点を含む区間の数である．

( Fig. 2.2 )

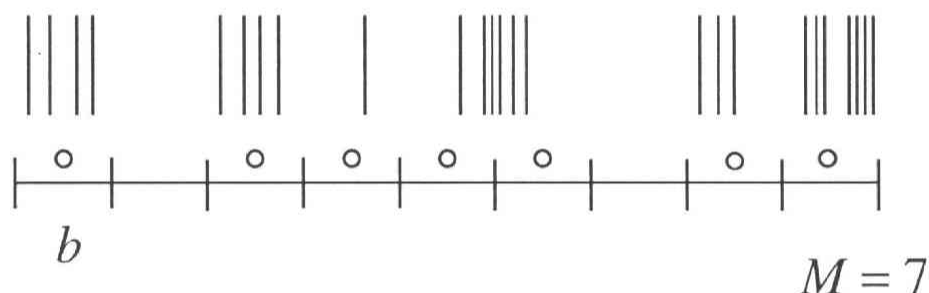
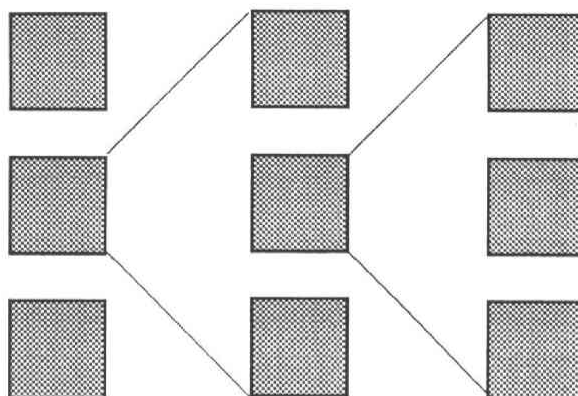


Fig. 2.2 容量次元の求め方

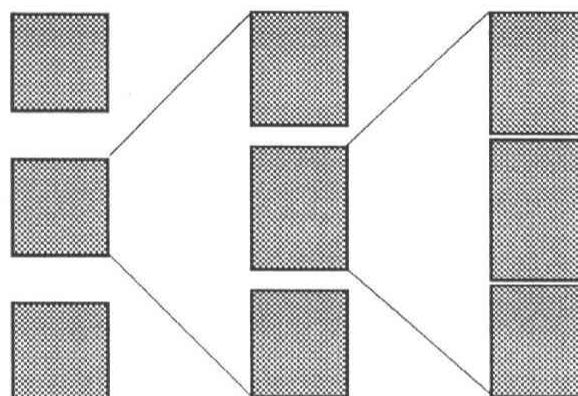
1 次元点集合（上図では線分の集合）を長さ  $b$  の区間に分割し，点（線分）が含まれる区間（上図の白丸印）の数  $M$  を数える．

広義の fractal は容量次元  $D$  の値によって，pure fractal ( $0 < D < 1$ )，fat fractal ( $D = 1$ )，skinny fractal ( $D = 0$ ) の三つに分類することができる．一般に fractal と呼ばれているのは pure fractal のことであり，他の二つは fractal とは呼ばれていない．

pure fractal  
 $0 < D < 1$



fat fractal  
 $D = 1$



skinny fractal  
 $D = 0$

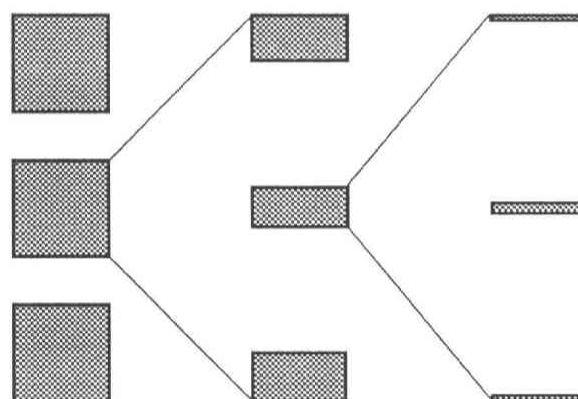


Fig. 2.3 広義の fractal の分類

広義の fractal は容量次元の大きさによって三つに分類される。拡大操作を繰り返しても常に同じ形に見えるのが pure fractal である。拡大するにつれてギャップが見えなくなり連続体のように見えるのが fat fractal である。逆に拡大するにつれてスペクトルが痩せ細り、点スペクトルのように見えるのが skinny fractal である。

Fig. 2. 3は三つの分類と部分を拡大する操作による違いを模式的に示したものである．pure fractal はスペクトルを拡大すると元と全く同じ構造のスペクトルが現われる．拡大を何度繰り返しても同じである．fat fractal の場合はスペクトルをどんどん拡大して見ていくにつれてギャップの割合が小さくなり，ついには1次元の連続体のように見える．逆に skinny fractal の場合は，拡大をするにつれてギャップの割合が増えてついには点スペクトルになるように見える．

各々について例を挙げると，pure fractal はフィボナッチ格子のエネルギースペクトルやハーパーモデルの臨界点でのエネルギースペクトルがある．また，fat fractal はハーパーモデルの非局在領域でのスペクトルがある．これらについてはこの章の以下の節で解説する．三つ目の skinny fractal の性質を示す例は少なくとも物理では今までに見つけられていない．また skinny fractal という呼び名も fat fractal との対応から本研究で名付けたものである．次章で述べるように電場をかけた場合のフィボナッチ格子のエネルギースペクトルの解析で本研究により RES という量が導入されるが，これは物理で始めて登場した skinny fractal の例であり本研究の一つの成果である．

1次元準周期系には変調ポテンシャルの特徴の違いによって二つの典型的なモデルがある．変調ポテンシャルが滑らかな関数の代表であるハーパーモデル（変調ポテンシャルが正弦波）と，区分的定数関数の代表であるフィボナッチ格子（山と谷の長さがある特殊な条件の非対称的矩型波）である．これら二つのモデルは非常に異なった性質を示すことが知られている．以下にこれらのモデルについて本研究との関連深いところを中心に解説する．

### (3) ハーパーモデル

変調ポテンシャルを表わす関数  $f(x)$  を

$$f(x) = 2\sin(2\pi x) \quad (2.6)$$

としたものがハーバーモデルである．変調ポテンシャルは位相依存性を考慮に入れて  $V_n(\phi)$  と書くことにすると

$$V_n(\phi) = 2V \sin(2\pi(n\omega + \phi)) \quad (2.7)$$

と表わされる．このモデルでの各格子点での変調ポテンシャルの値  $V_n$  の決まり方を Fig. 2.4 に示す．ただし，この図では位相変数  $\phi$  は 0 としている．

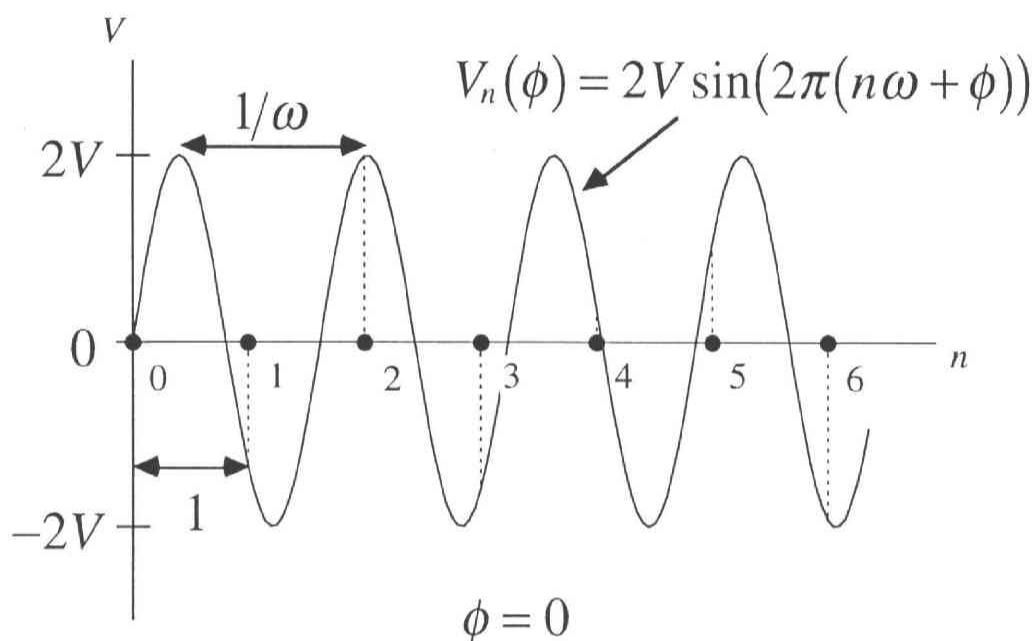


Fig. 2.4 ハーバーモデルの変調ポテンシャル

変調ポテンシャルの形は正弦波である．図では位相を 0 にとっている．各格子点での変調ポテンシャルの値を点線の長さで示している．

この方程式は，もともとは一様磁場下の 2 次元長方格子上的 1 電子波動関数を決定する方程式として導かれたものである<sup>19)</sup>．この意味で， $\phi$  は本質的に第 2 軸方向の波数を意味する．

これまでこのモデルについて多くの理論的研究がなされているが，以下に本研究との関連から重要となることについて解説する．

### (a) 波動関数の局在－非局在転移

ハーバーモデルは、変調ポテンシャルの振幅  $V$  の値によって波動関数（固有関数）が局在－非局在転移を起こすことが知られている<sup>20)</sup>。

$V < 1$  すなわち変調ポテンシャルが弱いときには全ての波動関数は系全体に広がっており、エネルギースペクトルは fat fractal となる。一方、 $V > 1$  すなわち変調ポテンシャルが強いときには全ての波動関数は指数関数的な局在を示し、エネルギースペクトルはやはり fat fractal である。この転移の臨界点は  $V = 1$  である。このとき全ての波動関数は局在性に関して臨界的となり、エネルギースペクトルは pure fractal となり、 $\omega$  が整数係数の 2 次方程式の解として与えられるいわゆる 2 次の無理数<sup>21)</sup>の場合には自己相似性を示す。変調ポテンシャルの振幅の大きさによって分類された上記三つの領域は、波動関数の性質からそれぞれ非局在領域、局在領域、臨界点と呼ばれる。

三つの領域について Fig. 2.5 にエネルギースペクトルを示した。

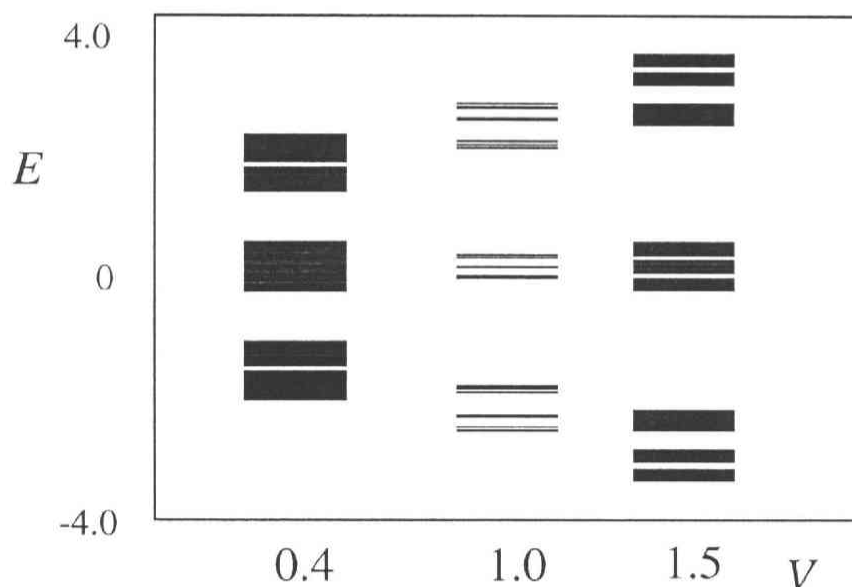


Fig. 2.5 ハーバーモデルのエネルギースペクトル

左から非局在領域（ $V=0.4$ ）、臨界点（ $V=1.0$ ）、局在領域（ $V=1.5$ ）の場合である。臨界点では pure fractal、非局在領域、局在領域では fat fractal である。

また, Fig. 2.6 には基底状態の波動関数を示した.

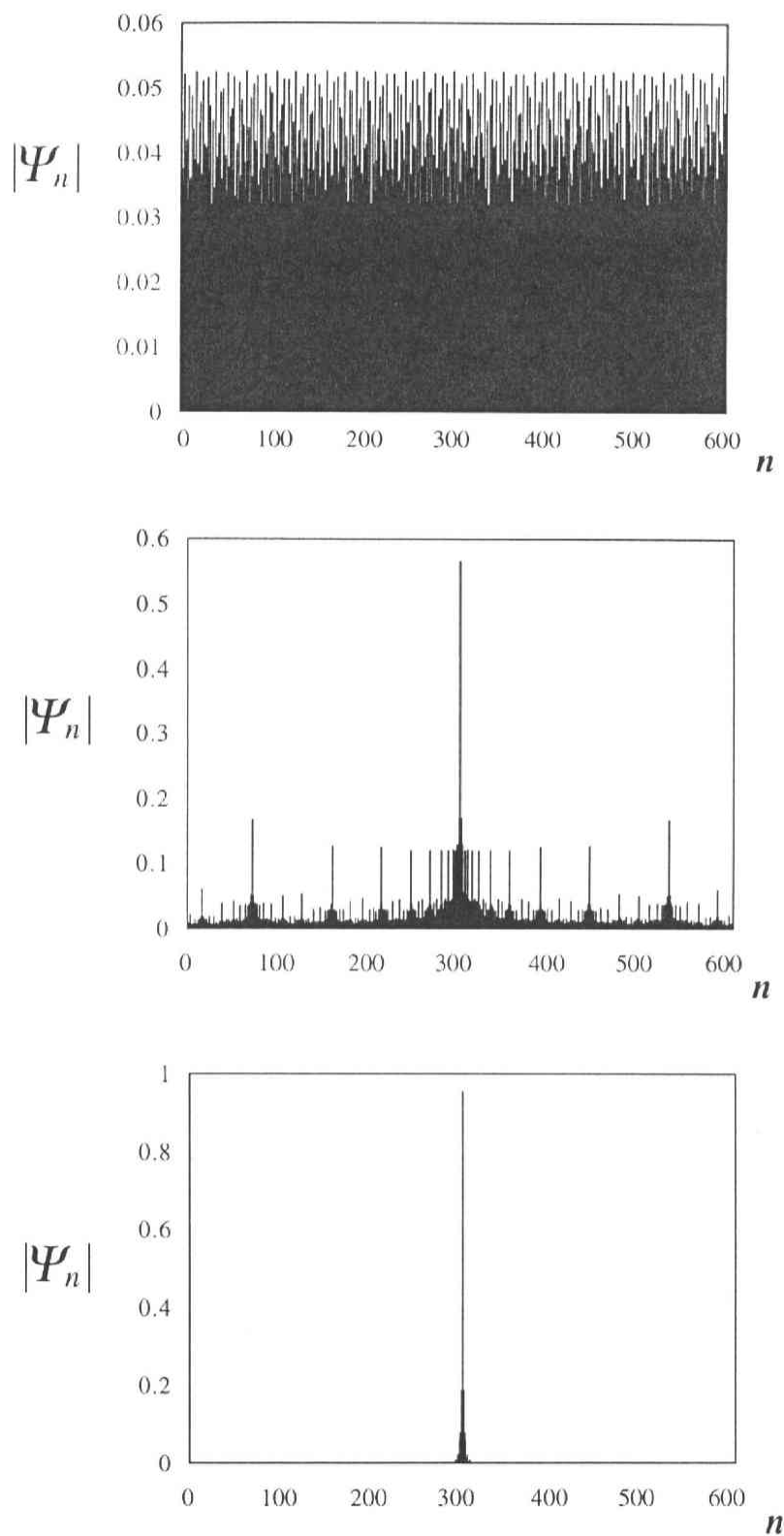


Fig. 2.6 ハーパーモデルの基底状態の波動関数

上から非局在領域 ( $V=0.4$ ), 臨界点 ( $V=1.0$ ), 局在領域 ( $V=1.5$ ).

### (b) バンドの対称性

ハーバーモデルのエネルギースペクトルは Fig. 2.5 に見られるように変調ポテンシャルの振幅  $V$  によらずエネルギー軸に関して対称である。このことはハミルトニアン<sup>2</sup>の対称性から導かれる。いま運動エネルギーの項を  $K_{op}$ ，変調ポテンシャルの項を位相  $\phi$  依存性を考慮に入れて  $V_{op}(\phi)$  と表わすことにすると，(2.1)式は

$$H_0(\phi) = K_{op} + V_{op}(\phi) \quad (2.8)$$

のように書き直すことができる。ここで  $V_{op}(\phi) = \sum_n |n\rangle V_n(\phi) \langle n|$  であり，また平行移動演算子  $U = \sum_n |n+1\rangle \langle n|$  によって  $K_{op} = -(\dot{U} + U^{-1})$  と表わされる。ハミルトニアン<sup>2</sup>の対称性を議論するためにユニタリ演算子  $I$ ， $J$  を導入する。それぞれ

$$I = \sum_n |-n\rangle \langle n| \quad (2.9)$$

$$J = \sum_n (-1)^n |n\rangle \langle n| \quad (2.10)$$

と定義する。これらは， $I^2 = 1$  および  $J^2 = 1$  を満たす。 $I$  は実空間での反転を表わす演算子であるが，運動エネルギーの項は  $I^{-1} K_{op} I = K_{op}$  のようにこの変換において不変である。また変調ポテンシャル  $V_n(\phi) = 2V \sin(2\pi(n\omega + \phi))$  が関係式  $V_{-n}(\phi) = -V_n(-\phi)$  を満たすことから，変調ポテンシャルの項は演算子  $I$  によって  $I^{-1} V_{op}(\phi) I = -V_{op}(-\phi)$  と変換される。一方，演算子  $J$  による変換を調べてみると，運動エネルギーの項は  $J^{-1} K_{op} J = -K_{op}$  と変換され，変調ポテンシャルの項は  $J^{-1} V_{op}(\phi) J = V_{op}(\phi)$  のように不変である。以上より，ハーバーモデルのハミルトニアンはユニタリー演算子  $Q = IJ$  によって

$$Q^{-1} H_0(\phi) Q = -H_0(-\phi) \quad (2.11)$$

と変換される．ここで  $Q^2 = 1$  を満たす．これはハミルトニアンが位相変数  $\phi$  に陽に依存する性質である．特に  $\phi = 0, 1/2$  のときには  $H_0(-\phi) = H_0(\phi)$  であるのでエネルギースペクトルは反転対称である．しかしながら，エネルギースペクトルは  $\phi$  に依存しない．よってエネルギースペクトルは反転対称中心をエネルギー軸 ( $E=0$ ) 上に持ち，その結果バンド構造はエネルギー軸に関して対称となる．

### (c) ミニバンド構造 (特に $V < 1$ の場合)

変調ポテンシャルの振幅  $V$  が 0 のときには，系は周期系となりエネルギースペクトルは一つのバンドとなる．ここに変調ポテンシャル  $V_n$  が加わると，バンド幅は広がり，同時にその周期が格子と非整合であるために無限個のバンドギャップが生じる．各ギャップの大きさは  $V$  が小さくなるほど小さくなる．特に， $V < 1$  (fat fractal) のときにはギャップを大きさの順に番号付けした場合有限個のギャップのみが有効な大きさを持ち，残りは番号と共に指数関数的に減少する．したがって，系はそれらに隔てられた有限個のミニバンドから成ると見ることができる<sup>22)</sup>．このようなミニバンドは実効的ミニバンドと呼ばれる．ここで，あるミニバンドに属する状態数の全状態数に対する割合をそのミニバンドの重率と呼ぶことにする．このとき，重率  $\xi$  は二つの整数  $n, m$  を用いて  $\xi = n - m\omega$  と書ける．これは，スペクトルに現れる全てのギャップに対して積分状態密度が二つの整数  $k, l$  を用いて  $k - l\omega$  と表されるという gap labelling 定理<sup>23)</sup>によって示される．ここで， $[n, m]$  をミニバンドの指数と呼ぶ．重率が  $0 < \xi < 1$  を満たすことから  $m$  は 0 でなく， $|n/m|$  は  $\omega$  の有理近似になっている． $n$  と  $m$  は同じ符号を持ち，それは  $|n/m| - \omega$  の符号に等しい． $n/m$  は  $\omega$  の最良有理近似と仮定することができる．もしそうでなければそのミニバンドはさらに小さなミニバンドに分割することができるからである．

重率  $\xi$  のミニバンドの状態で張られる部分空間の正規直交完全系として局在状態の基底がとれるならば各局在状態 (結晶の場合のワニエ状態に相当する状態) は密度  $\xi$  で空間分布する．この密度は格子定数  $1/\xi$  の周期格子のワニエ状



態の密度と同じである。以下、 $a' (= a/\xi = 1/\xi)$  をそのミニバンドの実効格子定数と呼ぶことにする。

Fig. 2.7 に  $\omega = \omega_G = (\sqrt{5} - 1)/2$  , すなわち黄金比の場合のミニバンド構造を模式的に示す。全体のバンドは最も大きな二つのギャップによって三つのミニバンドに分割される。中央のミニバンドは原点について対称なミニバンドで重率は  $\omega^3$  , 残りの二つのミニバンドは互いに鏡像関係にあるバンドで重率は  $\omega^2$  となる。ここで、 $\omega$  は  $2\omega^2 + \omega^3 = 1$  なる関係を満たす。それぞれのミニバンドは、さらに重率が  $\omega^2 : \omega^3 : \omega^2$  の比をなすような三つのより小さなミニバンドに分割される。このプロセスが無限に続き系は階層的なミニバンド構造をつくることになる。先に述べたように  $V < 1$  ( fat fractal ) の場合には有限個のギャップを除いて他のギャップは無視できる。このとき生じた実効的ミニバンドは一般に  $\omega$  のべき乗の重率を持つが、このプロセスの規則性から分かるように隣り合うミニバンドは必ず異なった重率を持つ。さらにそれぞれの重率の逆数として、実効格子定数が定義される。 $\omega$  のべき乗は  $\omega^2 = 1 - \omega$  ,  $\omega^3 = -1 + 2\omega$  , 一般的には  $\omega^k = (-1)^k (F_{k-1} - \omega F_k)$  のように  $\omega$  と 1 の整数 1 次結合で書き下すことができる。この二つの整数係数によって全てのミニバンドは指数付けすることができる。ここに現われる整数  $F_k$  はフィボナッチ数と呼ばれるもので、漸化式  $F_{k+1} = F_k + F_{k-1}$  及び初期条件  $F_0 = 0$  ,  $F_1 = 1$  によって定義される。具体的な数値を示すと  $\{F_k\} = \{0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, \dots\}$  であり、 $F_{k-1}/F_k$  は確かに  $\omega$  の最良有理近似となっていることが分かる。

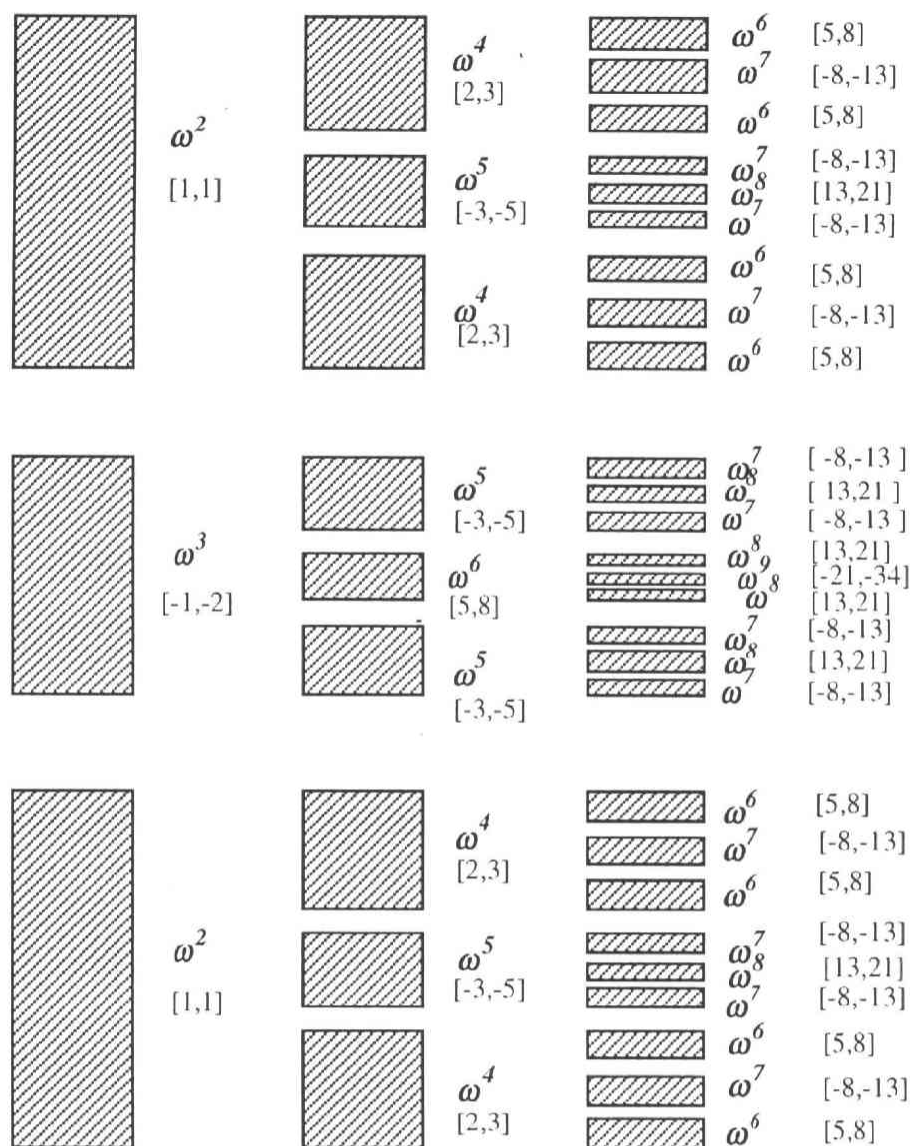


Fig. 2.7 ハーパーモデルのバンド分岐規則

一つのバンドは重率の比が  $\omega^2 : \omega^3 : \omega^2$  の三つのバンドに分裂する。その三つのバンドも各々  $\omega^2 : \omega^3 : \omega^2$  の三つのバンドに分裂する。このような規則に従って分裂したバンドは各々  $\omega$  のべき乗の重率を持つ。また  $\omega$  のべき乗が  $\omega$  と 1 の整数 1 次結合で表わされるため全てのバンドは 2 つの整数で指数付けすることができる。各バンドの右側に重率と指数を示している。

(d) エネルギースペクトルの自己相似性 ( $V=1$  の場合)

前項で述べたように、ハーバーモデルのエネルギースペクトルは階層的なミニバンド構造をつくる。特に  $\omega$  が2次の無理数の場合には、臨界点  $V=1$  のところでエネルギースペクトルは自己相似性を示す。Fig. 2.8 に  $\omega$  が黄金比の場合の様子を示した。全体のエネルギーバンドは最も大きな二つのギャップによって三つのミニバンドに隔てられるが、そのうち中央のミニバンド（重率  $\omega^3$ ，実効格子定数  $1/\omega^3$ ）を拡大すると全体のバンドと同じ構造を持っている。拡大したミニバンドのなかの三つのミニバンドのうち、中央のミニバンドを同様に拡大するとやはりもとのバンドと同じ構造になっている。この様にしてこの系のエネルギースペクトルは自己相似性を示す。中央のミニバンドと全体のバンドのバンド幅の比が数値計算によって 0.0728 と求められている。したがって相似比は 0.0728 である<sup>24)</sup>。

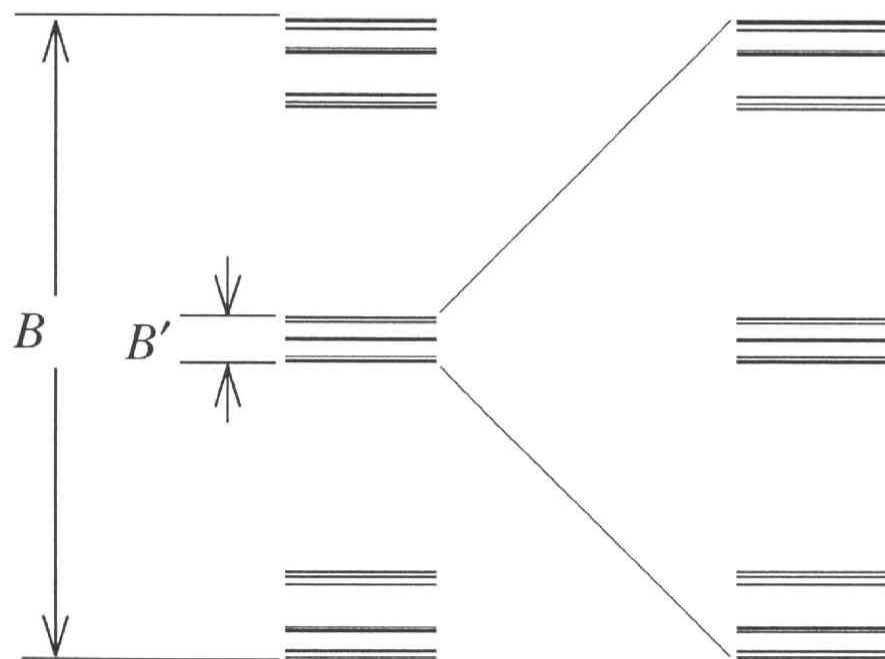


Fig. 2.8 エネルギースペクトルの自己相似性

左が全体のエネルギーバンドを表わし、右はバンド全体のうち真ん中のバンドを拡大したもの、全く同じ構造となっていることが分かる。相似比はバンド幅の比  $B'/B=0.0728$  である。

(e) 波動関数の重心によるエネルギーの番号付けと摂動論 ( $V > 1$ )

ここでの議論は本研究によって初めて明らかにされたものである。

変調ポテンシャルの振幅  $V$  が大きい場合、全ての波動関数は指数関数的な局在を示す。このような局在波動関数に対してはその重心を定義することができる。ハミルトニアン の位相依存性を考慮にいれて波動関数の重心を  $X_i(\phi)$  と書くことにすると、位置演算子を  $X_{op} = \sum_n |n\rangle n \langle n|$  として

$$X_i(\phi) = (\Psi_i(\phi), X_{op} \Psi_i(\phi)) \quad (2.12)$$

と表わすことができる。右辺の括弧は内積である。ここで、波動関数を重心の大きさの順、すなわち  $X_i(\phi) < X_{i+1}(\phi)$  となる様に番号付けをする。このような番号付けの規則に従った場合のエネルギー準位と波動関数を、ハミルトニアン の位相依存性を考慮にいれて  $E_i(\phi)$  及び  $\Psi_i(\phi)$  と書くことにする。このとき、ハミルトニアン の満たす関係式、(2.3)式及び(2.4)式から全ての番号  $i$  に対して

$$E_i(\phi+1) = E_{i+m}(\phi) \quad (2.13)$$

$$E_i(\phi) = E_{i-n}(\phi+\omega) \quad (2.14)$$

及び、

$$\Psi_i(\phi+1) = \Psi_{i+m}(\phi) \quad (2.15)$$

$$\Psi_i(\phi) = U \Psi_{i-n}(\phi+\omega) \quad (2.16)$$

を満たす整数  $m, n$  が存在することが言える。

一方、このような番号付けの下では、 $V \rightarrow \infty$  の極限で波動関数は各サイトに局在し  $\Psi_i(\phi) \rightarrow |i\rangle$  となる。このことから、二つの整数は各々  $m=0, n=1$  と求められる。したがって、波動関数及びエネルギー準位の位相に関する関係式

$$\Psi_i(\phi+1) = \Psi_i(\phi) \quad (2.17)$$

$$\Psi_i(\phi) = U\Psi_{i-1}(\phi+\omega) \quad (2.18)$$

$$E_i(\phi+1) = E_i(\phi) \quad (2.19)$$

$$E_i(\phi) = E_{i-1}(\phi+\omega) \quad (2.20)$$

が得られる．また，(2.17)式及び(2.18)式を用いると定義から明らかなように波動関数の重心も関係式

$$X_i(\phi+1) = X_i(\phi) \quad (2.21)$$

$$X_i(\phi) = X_{i-1}(\phi+\omega)+1 \quad (2.22)$$

を満たす．さらに(2.18)式，(2.20)式，(2.22)式を再帰的に用いると各々

$$\Psi_i(\phi) = U^i\Psi_0(\phi+i\omega) \quad (2.23)$$

$$E_i(\phi) = E_0(\phi+i\omega) \quad (2.24)$$

$$X_i(\phi) = X_0(\phi+i\omega)+i \quad (2.25)$$

が求められる．これらの式は，すべての番号  $i$  における  $\Psi_i(\phi)$ ， $E_i(\phi)$ ， $X_i(\phi)$  が  $\Psi_0(\phi)$ ， $E_0(\phi)$ ， $X_0(\phi)$  から求められることを意味している．

ここでエネルギー準位に関する(2.24)式を  $\phi=0$  として整理し直すと

$$E_0(i\omega) = E_i(0) \quad (2.26)$$

と書くことができる．ここで， $\{i\omega \bmod 1 \mid i \in \mathbb{Z}\}$  が区間  $[0, 1)$  で密であること及び  $E_0(\phi)$  の周期が 1 であることから， $i$  について十分大きなサンプルをとれば  $E_0(\phi)$  は  $E_0(i\omega)$  vs.  $i\omega \bmod 1$  すなわち  $E_i(0)$  vs.  $i\omega \bmod 1$  によって再現することができる． $E_0(\phi)$  の  $\phi$  依存性は  $\phi=0$  のときのエネルギー固有値の十分大きな集合から再現することができるのである．このことは位相変数  $\phi$  がエ

エネルギー準位の番号と変換性があるということであり，実際には  $\phi$  を変化させなくとも  $E_0(\phi)$  の位相依存性を見ることができることを意味している．このようにして再現した  $E_0(\phi)$  を Fig. 2.9 に示した．大まかな形は正弦波であり，四つの大きなギャップがあるのが特徴である．

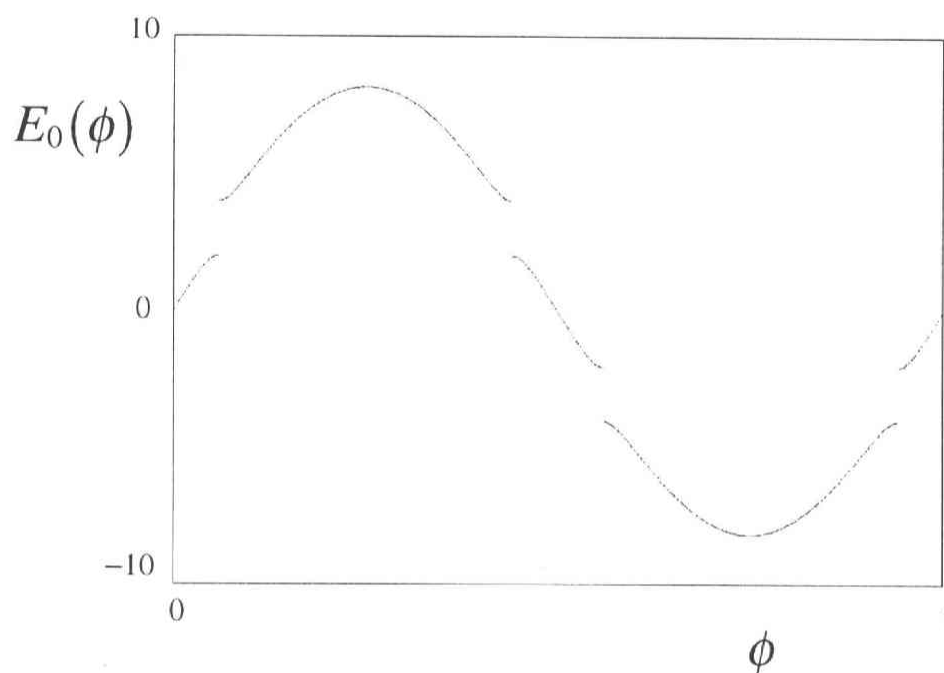


Fig. 2.9  $V=4.0$  のときの原点に局在する状態のエネルギー準位の位相依存性  
大まかには正弦波であり，四つの大きなギャップが見える．

一度  $E_0(\phi)$  が再現できれば，あとは (2.24) 式に従って位相を  $\omega$  ずつずらしたものを無限個重ねることでエネルギースペクトルを再現することができる．Fig. 2.10 には 0 番目から 29 番目までの準位を重ねたものと実際のエネルギースペクトルとを対応させて示した．

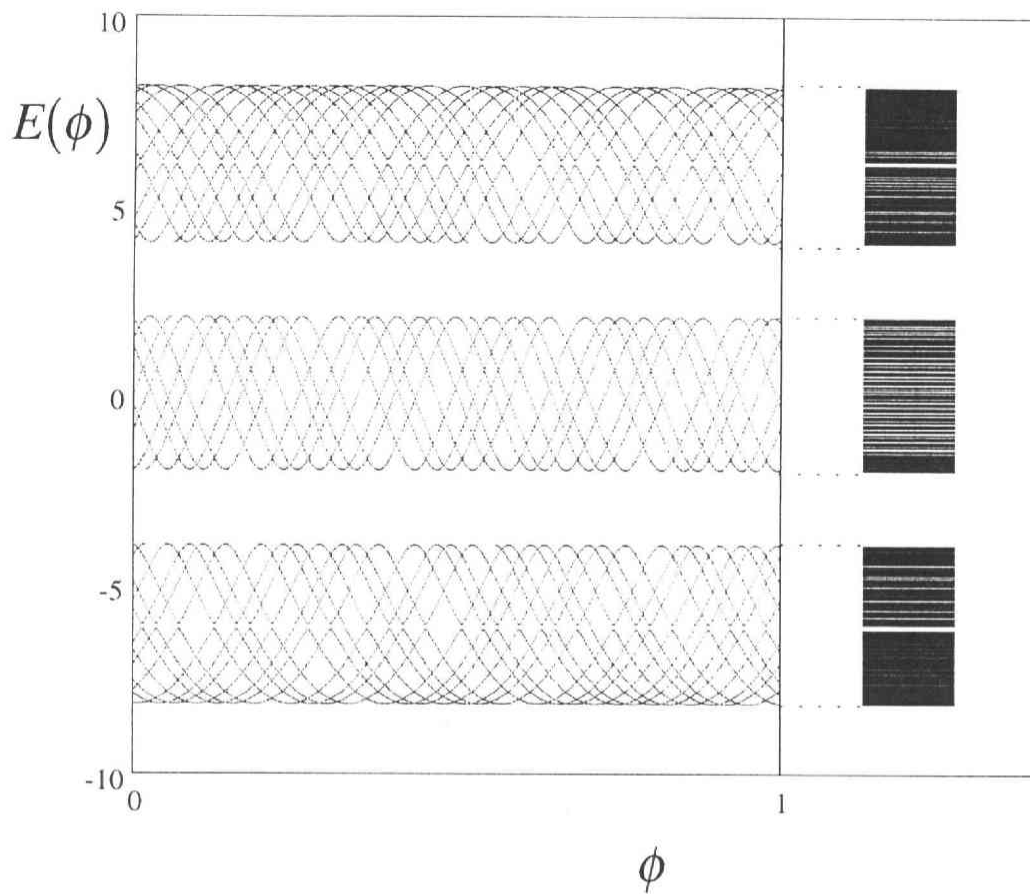


Fig. 2.10  $V=4.0$  のときのエネルギースペクトルの位相依存性

$E_0(\phi)$  から  $E_{29}(\phi)$  までの 30 準位を重ね合せたものと実際のエネルギースペクトルとの対応. 実際には無限個の準位を重ね合せるので位相依存性はなくなる.

実際のエネルギースペクトルは無限個の準位を重ね合せることによって得られる. 各準位は位相がわずづれてることを考えあわせると, 実際のエネルギースペクトルが位相に依存しないことが分かる.

同様のことが波動関数及びその重心についても言える. (2.26)式に相当する関係式は各々,

$$\Psi_0(i\omega) = U^{-i} \Psi_i(0) \quad (2.27)$$

$$X_0(i\omega) = X_i(0) - i \quad (2.28)$$

である．これらもエネルギースペクトルと同様の方法で  $\phi=0$  の時の値から位相依存性を再現することができるのである．

Fig. 2. 11 に 0 番目の格子点に局在する波動関数の重心の位相依存性と対応するエネルギーの位相依存性を示した．エネルギーの位相依存性にギャップが生じている位相で，波動関数の重心が大きく変化しているのが分かる．

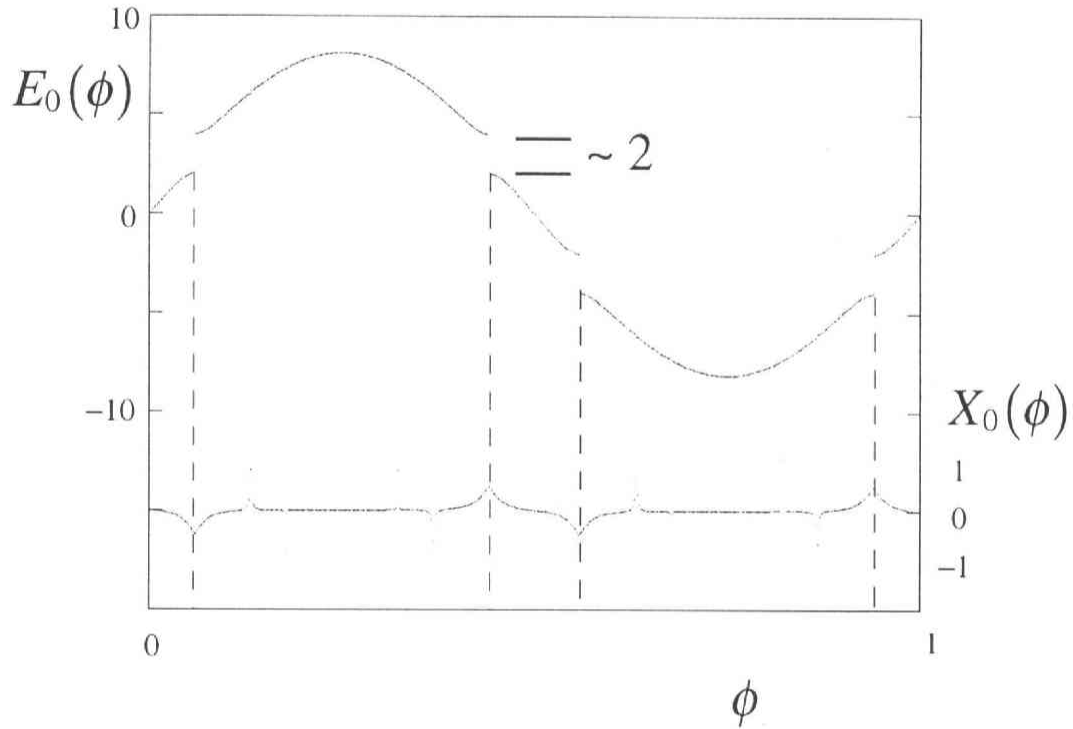


Fig. 2. 11  $V=4.0$  のときの波動関数の重心とエネルギーの位相依存性

上の正弦波的なグラフはエネルギーの位相依存性であり，下の直線的なグラフは対応する波動関数の重心の位相依存性である．波動関数の重心はほとんどの位相ではほぼ原点にあるが，エネルギーがギャップになっている位相では原点からずれている．また一番大きなギャップの大きさは跳び移り積分の 2 倍の 2 であり，対応する波動関数の重心は  $1/2$  または  $-1/2$  となっている．

次に，このような構造の物理的意味を探るためにこの系を摂動論を使って考察する．変調ポテンシャルの値が  $V>1$  であるこの領域では，(2.8)式の第 1 項の  $K_{op}$  を摂動として扱うことができる．このとき，非摂動系のハミルトニア



ンは  $V_{op}(\phi)$ ，波動関数は  $|i\rangle$  となる．非摂動エネルギーを  $E_i^{(0)}(\phi)$  と書くと，非摂動系のシュレーディンガー方程式は

$$V_{op}(\phi)|i\rangle = E_i^{(0)}(\phi)|i\rangle \quad (2.29)$$

となり，したがって

$$E_i^{(0)}(\phi) = \langle i|V_{op}(\phi)|i\rangle = 2V \sin(2\pi(i\omega + \phi)) \quad (2.30)$$

と求められる．このことから，エネルギーの位相依存性  $E_0(\phi)$  がおよそ正弦波になる理由が理解できる．

次に， $E_0^{(0)}(\phi)$  にギャップの生じる理由を考察する．Fig. 2.12 は，原点に局在する状態に対する非摂動エネルギー  $E_0^{(0)}(\phi)$  に，両隣の格子点 1 と -1 に局在する状態の非摂動エネルギー  $E_1^{(0)}(\phi)$  及び  $E_{-1}^{(0)}(\phi)$  を重ねたものである． $E_1^{(0)}(\phi)$  は  $E_0^{(0)}(\phi)$  を位相方向に  $-\omega$  だけ，逆に  $E_{-1}^{(0)}(\phi)$  は  $\omega$  だけずらしたものに相当する．このとき二つのスペクトルが交差するところで縮退が起きるが，摂動によって縮退が解け乗り換えが起こってギャップが生じる．また，両隣の格子点に局在する状態の交差による不連続点はちょうど対称な位置に生じる．これが， $E_0(\phi)$  に四つの大きなギャップが生じる理由である．

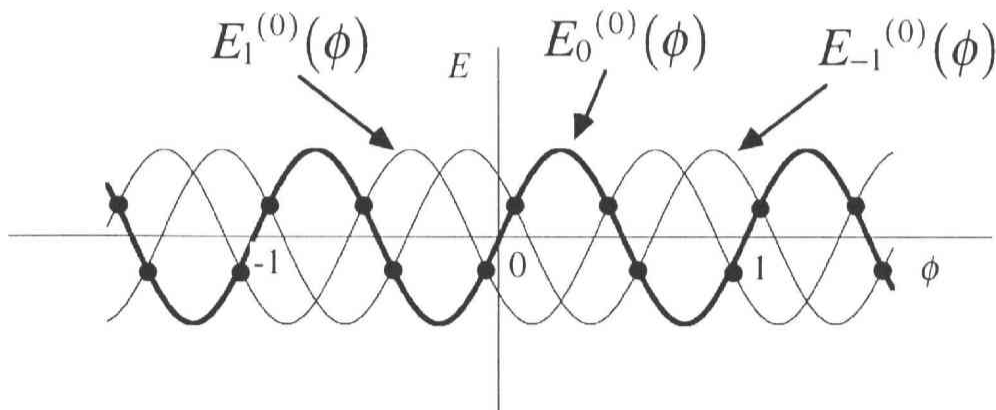


Fig. 2.12  $V > 1$  のときのエネルギー準位の位相依存性とギャップ

原点に局在する状態の非摂動エネルギー  $E_0^{(0)}(\phi)$  (太線) 及び格子点  $\pm 1$  に局在する状態の非摂動エネルギー  $E_{\pm 1}^{(0)}(\phi)$  (細線)，ギャップの位置を黒丸で示した．

これらのギャップの大きさを調べたところ跳び移り積分の2倍の2となっていた。これは縮退した準位の摂動による1次近似で期待される値に等しい。さらにこのエネルギー準位の位相依存性をよく見ると小さなギャップが沢山あることが分かる。これらは、より遠い格子点を中心に局在する波動関数との相互作用によって生じたものである。 $\omega$ が無理数であるためにこの不連続点は無限個あるが、非常に遠くの格子点に局在する状態との間の相互作用は高次の摂動となり実際には見えなくなる。

また、エネルギーの位相依存性に四つの大きなギャップが生じる位相での波動関数の重心は隣の格子点とのちょうど中点である。これは隣の格子点に局在する波動関数と一対一に混じっていることを示している。いま、原点に局在する状態の非摂動波動関数  $|0\rangle$  と格子点1に局在する状態の非摂動波動関数  $|1\rangle$  との相互作用を考えると、摂動の1次近似では波動関数は  $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$  及び  $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$  となり、その重心はどちらも  $1/2$  である。同様なことは格子点  $-1$  に局在する状態についても言える。

このように波動関数の重心による番号付けを行うと、局在領域での理解が非常に容易になることが本研究によって明らかにされた。この解析の方法は電場をかけた場合にも非常に有効なものである。

#### (4) フィボナッチ格子

ハーバーモデルと同様によく研究されているのが、フィボナッチ格子である。このモデルの変調ポテンシャルを決める関数は

$$f(x) = [x] - [x - \omega_G^2] \quad (2.31)$$

のように定義される。ただし  $[x]$  は  $x$  を超えない最大の整数を表わす。また  $\omega_G$  は前節で述べた黄金比である。以下では、 $\omega_G$  を単に  $\omega$  と書くことにする。したがって、 $V_n$  は

$$V_n = V([n\omega + \phi] - [n\omega + \phi - \omega^2]) \quad (2.32)$$

と表わされる．このモデルの変調ポテンシャルの値  $V_n$  の決まり方を Fig. 2. 13 に示す．

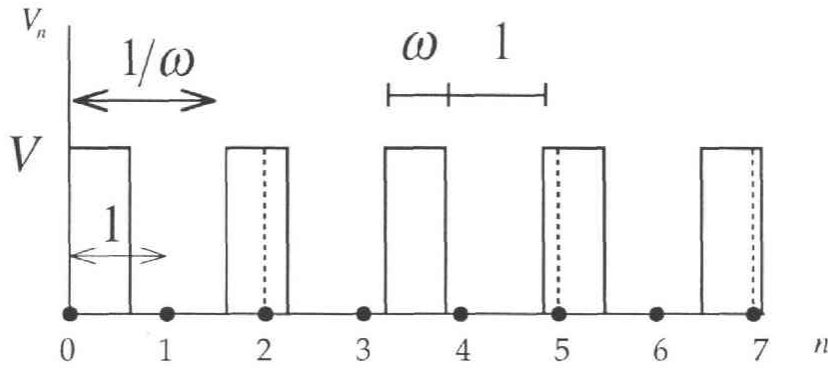


Fig. 2. 13 フィボナッチ格子の変調ポテンシャル

山の部分の長さは黄金比  $\omega$  であり谷の部分の長さは格子定数と同じ 1 である．したがって，この変調ポテンシャルの周期は  $1 + \omega$  であるがこれは  $1/\omega$  に等しい．

変調ポテンシャルの山の部分の長さは黄金比  $\omega$  であり谷の部分の長さは格子定数と同じ 1 である．したがって，この変調ポテンシャルの周期は  $1 + \omega$  であるがこれは  $1/\omega$  に等しい．このモデルがフィボナッチ格子と呼ばれるのは各格子点の変調ポテンシャルの値  $V_n$  が取る値  $V, 0$  の並びがフィボナッチ列と呼ばれる特殊な並びになることに由来している．

フィボナッチ列とは二つの要素  $A, B$  をデフレーション操作と呼ばれる変換操作

$$B \rightarrow A$$

$$A \rightarrow AB$$

を繰り返すことによって得られる並びである．具体的な並びを示すと

B  
A  
AB  
ABA  
ABAAB  
ABAABABA

となる．フィボナッチ列はデフレーション操作から分かるように準周期構造を持ち自己相似性を示すことが知られている．

このモデルは1次元準結晶とも呼ばれているが，それは実際の準結晶の格子面の並びが持つ構造がフィボナッチ列と類似の構造を持っているからである．また，このモデルがハーバーモデルと大きく異なる点は，変調ポテンシャルを決める関数が不連続であるということである．このため多くの点においてハーバーモデルとは異なった性質を示す．以下では本研究と関係する性質について解説する．

#### (a) 変調ポテンシャルの構造の位相依存性

フィボナッチ格子の変調ポテンシャルの構造を，位相依存性に注目してまとめておく．Fig. 2. 14 はフィボナッチ格子の変調ポテンシャルと位相  $\phi$  との関係を模式的に表わしたものである．変調ポテンシャルの周期は 1 であるので，位相  $\phi$  が 0 から 1 まで変化すると元と全く同じ環境に戻る．その途中で，各格子点での変調ポテンシャルの値が変化することがある．図で変調ポテンシャルの値が  $V$  から 0，あるいはその逆に変わっている場所を示した．

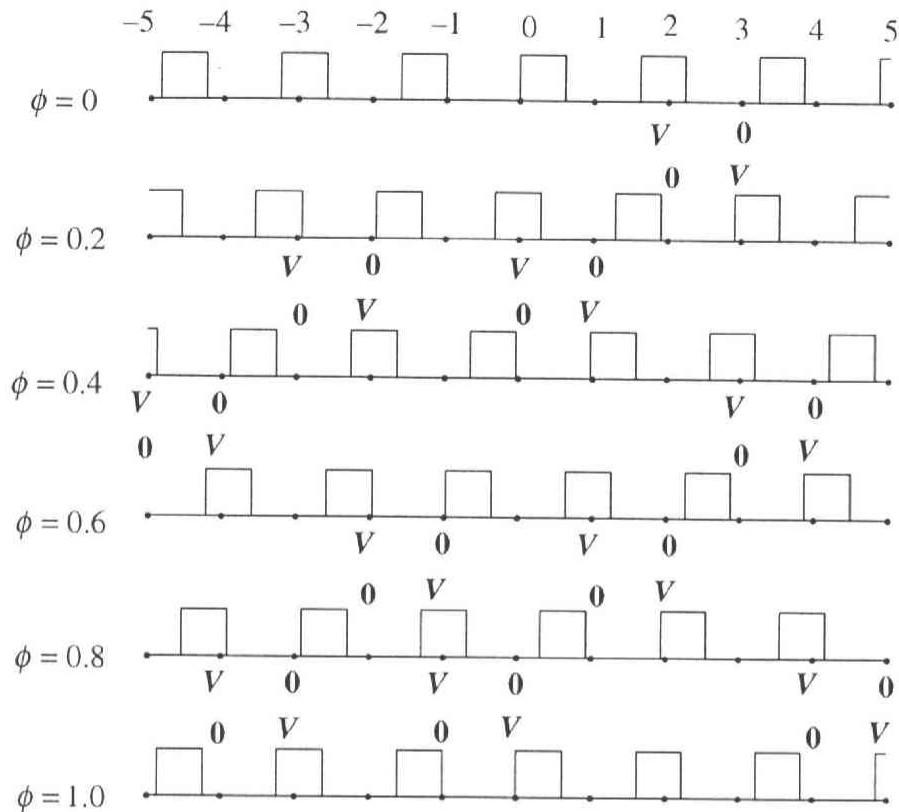


Fig. 2.14 変調ポテンシャルの入れ替え

位相を  $0$  から  $1$  まで  $0.2$  刻みで変化させたときに、変調ポテンシャルの値が変化する様子を示した。ポテンシャルの谷の部分の長さが  $1$  なので、ポテンシャルの値の変化は隣り合う格子点で値が入れ替わるという形でのみ生じる。

変調ポテンシャルの値が  $0$  である範囲の長さが格子定数の  $1$  に等しいために、変調ポテンシャルの値の変化は隣り合う二つの格子点で同時に起こる。その規則はある格子点  $i$  が  $V$  から  $0$  に変わるときに格子点  $i+1$  が  $0$  から  $V$  に変わる、というものでそれ以外の場合はない。このような変調ポテンシャルの値の並びの変化を変調ポテンシャルのフリップと呼ぶことにする。

次に変調ポテンシャルのフリップが起こる条件を議論する。

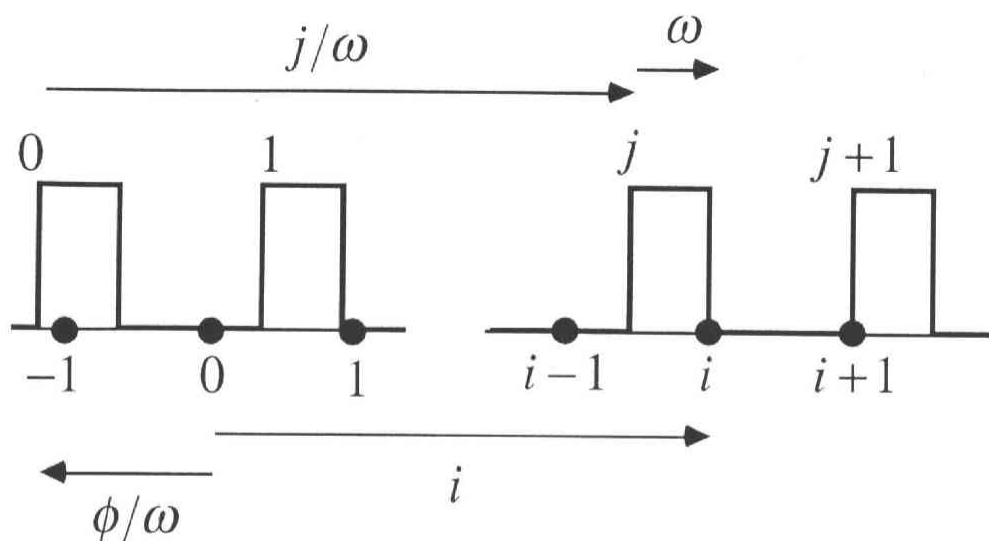


Fig. 2.15 ポテンシャルのフリップが起こる条件

位相  $\phi$  で格子点  $i$  での変調ポテンシャルの値が  $V$  から  $0$  に変化するときの模式図. 条件式  $i + \phi/\omega = j/\omega + \omega$  から  $\phi = j + 1 - (1+i)\omega$  が求められる.

任意の格子点  $i$  で変調ポテンシャルの値が  $V$  から  $0$  に変わるのは, Fig. 2.15 より  $j$  を整数として条件式  $i + \phi/\omega = j/\omega + \omega$  を満たす時である. これから,  $\phi = j + 1 - (1+i)\omega$  と求められる. すなわち, 位相  $\phi$  が二つの整数  $n, m$  を用いて  $\phi = n - m\omega$  と表わされる時に変調ポテンシャルがフリップする.

#### (b) Conway の定理とその精密化

フィボナッチ列の構造上の特徴として Conway の定理<sup>25)</sup>がある. この定理は “フィボナッチ列上の任意の局所構造に着目すると, その中心からその局所構造のサイズの高々 2 倍程度の距離のところに同じ局所構造が存在する.” というものである. ここで, 局所構造とはフィボナッチ列上の有限の長さのパターンを差す.

本研究では後の議論のためにこの定理を精密化した. この精密化も本研究の一つの成果である. 精密化された Conway の定理は次の三つである.

1. サイズ  $d$  を決めたとき, そのサイズの局所構造で互いに異なるものは  $d+1$  個しかない.
2. 任意の局所構造を一つとった時に, その局所構造は二つの隣り合うフィボナッチ数の間隔で並び, それら二つの間隔の並びはフィボナッチ列をなす.
3. ある局所構造が二つの間隔  $F_k, F_{k+1}$  で並ぶとき, その局所構造の密度は  $\omega^{k-1}$  となる.

ここで, 2 の様な並びをフィボナッチ配列と呼ぶことにする. また, 3 の局所構造の密度とは格子点数に対する局所構造の数の割合のことである. 3 は 2 からの帰結として得られる.

これらの精密化された Conway の定理をフィボナッチ格子上のポテンシャル並びの場合を例にして説明する. 1 は例えば  $d = 3$  の場合, フィボナッチ格子上に存在するサイズ 3 の局所構造は 0V0, 00V, V00, V0V の 4 種類しかないということである. また 2 については 00V という局所構造に着目した場合を例として Fig. 2. 16 に示した. 00V という局所構造は 3 と 5 という二つの隣り合ったフィボナッチ数の間隔を持って並び, 3 と 5 の並びは 53553535.... というようにフィボナッチ列をなしていることが分かる. 3 は 00V という局所構造の密度が  $\omega^3$  となることを示している.

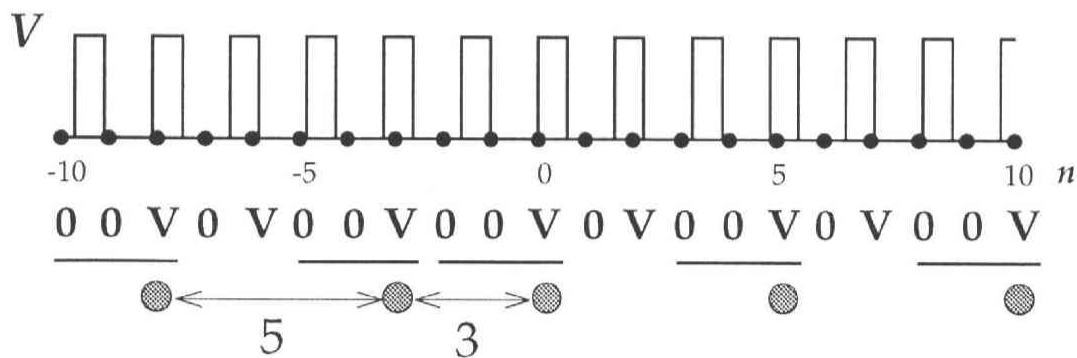


Fig. 2. 16 Conway の定理の精密化

00V という局所構造は間隔 5 と 3 のフィボナッチ配列をなしている. またその密度は  $\omega^3$  である.

(c) 電子状態

フィボナッチ格子の波動関数は  $V = 0$ （周期系）でない限り全ての状態が局在性に関して臨界的である．すなわちハーバーモデルとは異なり有限の  $V$  では局在-非局在転移は起こらない．また，これに伴ってエネルギースペクトルは全ての領域で pure fractal となり，自己相似性を示す<sup>26)</sup>．Fig. 2. 17 にフィボナッチ格子のエネルギースペクトルと波動関数を示した．

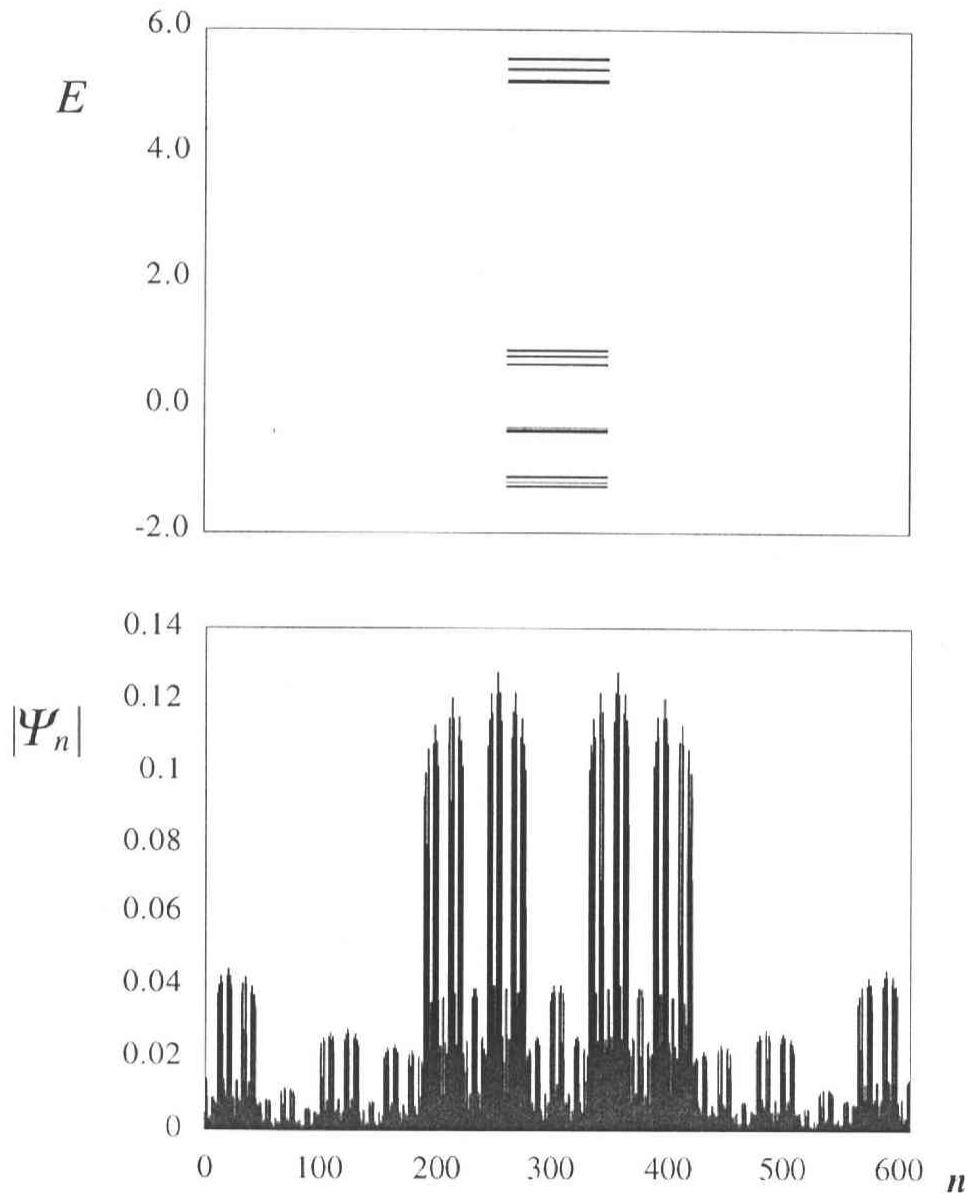


Fig. 2. 17 フィボナッチ格子のエネルギースペクトルと波動関数  
 $V=5.0$  の場合のエネルギースペクトル（上）と基底状態の波動関数（下）．



このモデルに関する研究は、現実の準結晶と直接結びつくという点でハーバーモデルよりも興味深い様に思われる。また、序論で述べたような準周期超格子として実際に作製可能であることから注目されている。

## 2-2 一様電場下のモデル

### (1) 周期系のシュタルクラダー

本研究のモデルを定義する前に周期系に一様電場をかけた場合についてまとめておく<sup>3)27)</sup>。考える系のハミルトニアン  $H_p$  は

$$H_p = K_{op} + F_{op} \quad (2.33)$$

のように与えられる。  $F_{op}$  は一様電場によるバイアスポテンシャルを表わす項で

$$F_{op} = \sum_n |n\rangle n F \langle n| \quad (2.34)$$

のように書ける。  $F$  は1格子分のバイアスポテンシャルの差で、電場の強さを表わすが以下ではしばしば  $F$  を電場と呼ぶ。この節では格子定数を  $a$  とする。

この系の性質はハミルトニアンに含まれる二つの項  $K_{op}$  と  $F_{op}$  との競合で決まる。バイアスポテンシャルの差が電場がない場合のバンド幅  $B$  に等しいような2点間の距離  $L$  を導入すると  $L = (B/F)a$  で与えられ、この長さは波動関数の局在長になっていることが知られている。

次に電場が弱い場合 ( $F \ll B$  又は  $L \gg a$ ) と強い場合 ( $F \geq B$  又は  $L \leq a$ ) に分けて物理的描像を解説する。

### (a) 電場が弱い場合 (準古典的)

電場はバンド間遷移を起こすほど強くはなく、また位置とともに緩やかに変

化すると仮定する。このとき、電子の運動は有効ハミルトニアンによって記述される<sup>6)</sup>。このような場合に、Fig. 2. 18に示すような電場によって傾いたバンド描像が可能となる。エネルギー一定の古典的な電子はこの傾いたバンド内で往復運動をする（Bloch振動）。

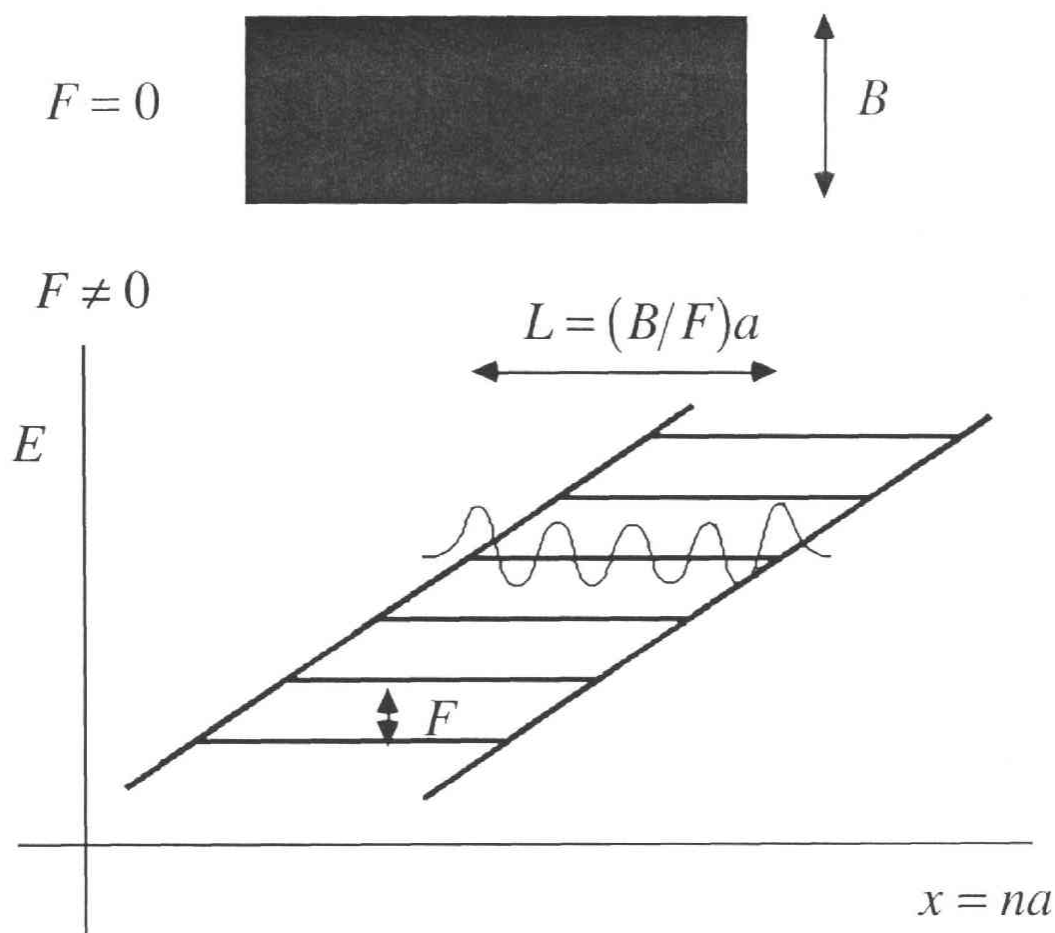


Fig. 2. 18 周期系のシュタルクラダー

電場によってバンドは傾き、全ての状態は局在する。準位間隔は  $F$  である。

ある状態がこの系の固有状態であるとする。この固有状態を1格子だけ平行移動した状態もやはり固有状態であり、エネルギー固有値は電場の強さ  $F$  だけ異なることが言える。このことは、1格子定数分の平行移動演算子  $U$  を用いて (2.33) 式で表わされるハミルトニアンが

$$U^{-1}H_pU = H_p + F \quad (2.35)$$

と変換されることから分かる．その結果，系のエネルギースペクトルは  $E_i = iF$  となり，等間隔のシュタルクラダーとなる．また，波動関数は全て同じ形で格子間隔 1 で並んでいる．

格子点  $n$  での波動関数の振幅を  $\psi_n$  とし，シュレーディンガー方程式を波動関数の振幅に関して書き下すと

$$-(\psi_{n-1} + \psi_{n+1}) + nF\psi_n = E\psi_n \quad (2.36)$$

となる．エネルギー固有値  $E_i = iF$  を代入して整理すると

$$\psi_{n-1} + \psi_{n+1} = \frac{2(n-i)}{L/2a} \psi_n \quad (2.37)$$

となるが，これは Bessel 関数の漸化式と同じ形である．したがって，エネルギー固有値  $iF$  の波動関数の格子点  $n$  での振幅は Bessel 関数  $J_m(x)$  を用いて

$$\psi_n^{(i)} = J_{n-i}(L/2a) \quad (2.38)$$

と表わすことができる．

#### (b) 電場が強い場合（量子的）

電場が強い場合には運動エネルギーを摂動とする摂動論によって理解できる．非摂動系でのエネルギー  $E_i^{(0)}$ ，波動関数  $\Psi_i^{(0)}$  はそれぞれ

$$E_i^{(0)} = iF \quad (2.39)$$

$$\Psi_i^{(0)} = |i\rangle \quad (2.40)$$

で与えられる．摂動による 1 次の補正まで考慮に入れると波動関数は

$$\Psi_i = |i\rangle + \frac{B}{4F}(|i+1\rangle - |i-1\rangle) \quad (2.41)$$

となる．一般に  $n$  次の補正，すなわち  $|i+n\rangle$  の係数は

$$\frac{(-B)^n}{(E_i - E_{i+1})(E_i - E_{i+2})\cdots(E_i - E_{i+n})} = \frac{1}{n!} \left(\frac{B}{F}\right)^n \quad (2.42)$$

のオーダーとなり，波動関数のすそが距離と共に急激に減衰することが分かる．

一方エネルギー準位は  $n$  次の補正まで考慮に入れても変わらない．これは， $n$  次の補正が  $|i+n\rangle$  と  $|i-n\rangle$  からのもので両者の寄与が互いに打ち消し合うことによる．

## (2) 一様電場下の非周期系—研究の目的—

非周期系（準周期系及びランダム系）に一様電場を加えた系についてここでまとめておく．これまでの研究では，主に 1 次元あるいは電場のかかった方向のみを考える擬 1 次元の問題である．非周期系は周期系に変調ポテンシャルを加えた系として与えられるので，系のハミルトニアンは

$$H_{non-p} = K_{op} + V_{mod} + F_{op} \quad (2.43)$$

と表わされる． $V_{mod} = \sum_n |n\rangle V_n \langle n|$  は変調ポテンシャルを表わす演算子であり，準周期系の場合は前述の定義では  $V_{mod} = V_{op}(\phi)$  であり， $V_n$  が  $n$  に関して準周期的になっている．一方ランダム系の場合の  $V_n$  はランダムな並びである．

このようなモデルを使った研究でこれまでに分かっていることは序論で述べたとおりである．少し詳しく述べると，

1. すべての状態はワニエシュタルク局在を示し，その局在長は周

期系の場合と同様  $(B/F)a$  程度である.

2. エネルギースペクトルは離散的となり, 平均間隔  $F$  の非一様なシュタルクラダーとなる.

である<sup>17) 18)</sup>.

これらの結果は次のような簡単な考察によって理解できる.

最初に述べたように非周期系は周期系に変調ポテンシャルを加えた系として与えられる. 変調ポテンシャルはワニエ表示で対角的であるので, 波動関数を各格子点に局在させる傾向がある. 一様電場下の周期系で波動関数が局在するため, 系に局在傾向を強める変調ポテンシャルが加わっても波動関数が局在することは容易に理解できる.

いま, 局在波動関数の局在中心を  $x_c$  とするとエネルギー準位  $E_i$  はおよそ

$$E_i \approx F \left( \frac{x_c}{a} \right) \quad (2.44)$$

で与えられる. その誤差が電場がない場合のバンド幅  $B$  程度であることから局在長は  $(B/F)a$  程度であることが理解できる.

一方, エネルギースペクトルの平均間隔が  $F$  となることは次のように考えれば明らかである. 系のサイズが  $N$  である場合両端に局在する波動関数の局在中心間の距離はおよそ  $Na$  で与えられるため, それらの状態のエネルギー差はおよそ  $NF$  となる. その間に  $N$  個の状態が存在することを考えれば, 平均間隔が  $F$  となることが理解できる.

最後に, エネルギー準位の非一様性は変調ポテンシャルを摂動として扱う摂動論の範囲で次のように理解できる.

非摂動系を一様電場下の周期系とすると  $i$  番目の非摂動エネルギー  $E_i^{(0)}$  は

$$E_i^{(0)} = iF \quad (2.45)$$

で与えられる．実際のエネルギー準位  $E_i$  からのシフトを  $\Delta_i$  と書くと

$$\Delta_i = E_i - iF \quad (2.46)$$

と表わされる．非摂動系の  $i$  番目の準位の波動関数を  $\Psi_i^{(0)}$  と書くことにすると  $\Delta_i$  は摂動によるエネルギーの 1 次補正として

$$\Delta_i \approx (\Psi_i^{(0)}, V_{mod} \Psi_i^{(0)}) \quad (2.47)$$

で与えられる．非摂動系の波動関数（周期系のワニエシュタルク局在状態）はエネルギーの番号  $i$  と共に平均で 1 格子ずつ右にずれていくが，変調ポテンシャルの並びが非一様なのでシフト  $\Delta_i$  も非一様となることが分かる．

以上の考察で分かるようにこれまでの研究は変調ポテンシャルの非一様性から導き出される結論であって，準周期系とランダム系を区別する結果ではない．また，周期系やランダム系とは異なる準周期系特有の性質を反映した結果は一つ得られていない．

本研究の目的をここで改めて述べると

1. 準周期系に一樣電場をかけた系での電子状態を調べる．
2. 一樣電場下においてランダム系と準周期系との違いを明らかにする．
3. 準周期系の持つ秩序構造がシュタルクラダーに与える影響を明らかにする．

ということである．

## 第 3 章 数値計算

ここでは、はじめに本研究で行った具体的な計算方法について述べる。次に計算結果について準周期系一般に成り立つ性質をまとめ、その物理的意味を考察する。その後、ハーパーモデル、フィボナッチ格子それぞれにおける計算の結果とその物理的な意味についての解釈を行う。

### 3-1 計算方法

#### (1) 一様電場下の準周期系（本研究のモデル）

1次元準周期系（ハーパーモデルとフィボナッチ格子）に一様電場をかけた系のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H(\phi) &= H_0(\phi) + F_{op} \\ &= K_{op} + V_{op}(\phi) + F_{op} \end{aligned} \quad (3.1)$$

と書ける。各格子点におけるポテンシャルの値  $V_n + nF$  の決定のされ方をハーパーモデルとフィボナッチ格子のそれぞれの場合について Fig. 3.1 に示す。以下の本研究における計算では跳び移り積分  $t$  と格子定数  $a$  をそれぞれエネルギーと長さの単位とした。この系は四つのパラメータ  $F$ ,  $V$ ,  $\omega$ ,  $\phi$  を含む。

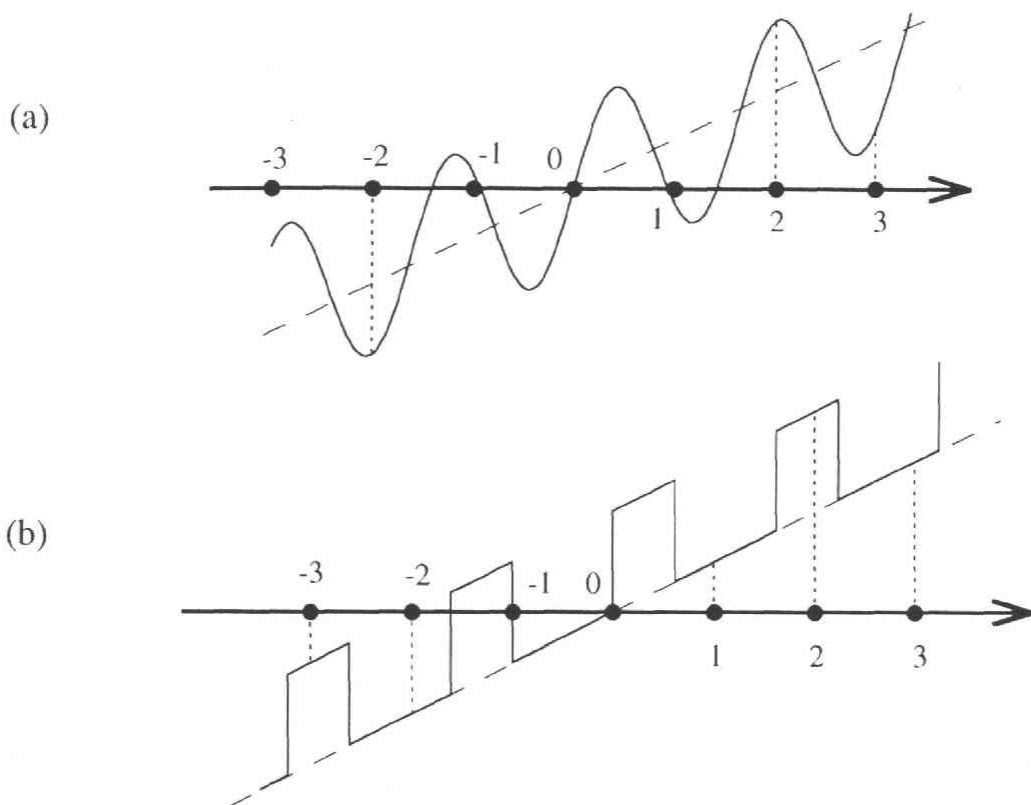


Fig. 3.1 一様電場下の準周期系のポテンシャル

(a) 一様電場下のハーバーモデルのポテンシャル. (b) 同フィボナッチ格子のポテンシャル. 破線は電場によるバイアスポテンシャルである.

## (2) 計算の条件

このような二つのモデルを使い、二つのパラメータ  $V$  と  $F$  のいくつかの組み合わせについて数値計算を行った。1000 個の格子点を含む有限サイズの系を用いて、(3.1)式で表わされるハミルトニアンを数値的に対角化し、エネルギー固有値と対応する固有関数を求めた。但しハーバーモデルについては  $\omega = \omega_G$  (黄金比) の場合についてのみ計算した。境界条件としては固定端条件を採用し、端の影響のないデータのみを扱うことによって仮想的に無限系と考えた。

系の両端に近いところでの波動関数の振幅が大きいものが、端の影響を受けていると考えられる。前章で述べたように波動関数の局在長は  $B/F$  ( $B$  は電場をかけないときのバンド幅,  $F$  は電場の大きさ) 程度かあるいはそれ以下であ



る．したがって，求められた固有値のうち両端からこの局在長の3倍程度の距離内の格子点上に波動関数の重心のあるものを，端の影響を受けたデータとして除外して議論した．

### 3-2 計算結果と考察

#### (I) 準周期系のシュタルクラダー<sup>28)</sup>

はじめに，本研究で取り上げた二つのモデル（ハーバーモデルとフィボナッチ格子）に共通する解析の方法について述べる．その結果得られた性質は準周期系一般について成り立つものである．

##### (a) エネルギー準位の平均間隔と変調関数

数値的に得られたエネルギー準位を大きさの順に番号付けしたものを  $E_i$  と置く． $V = 0.4$ ， $F = 0.05$  の場合のハーバーモデルの場合のエネルギー準位を番号  $i$  に対してプロットしたのが Fig. 3.2 である．

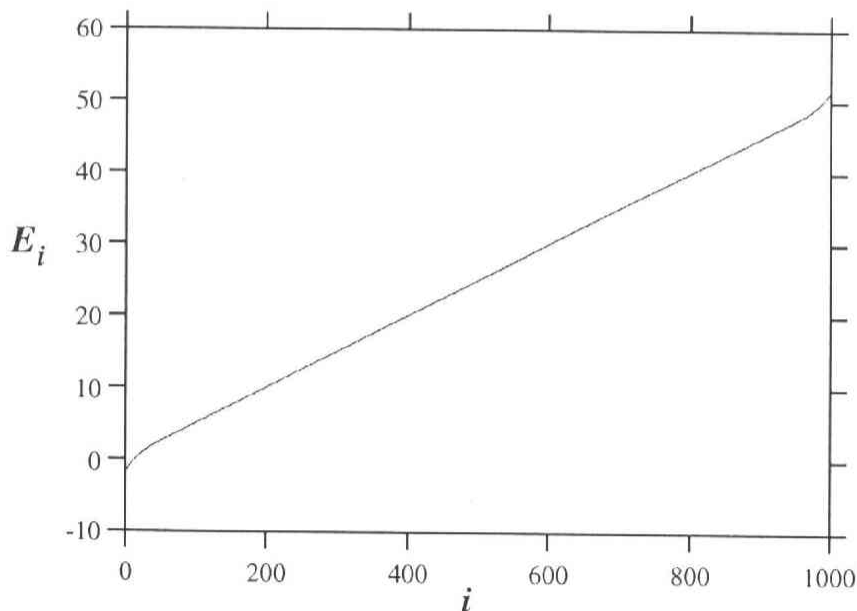
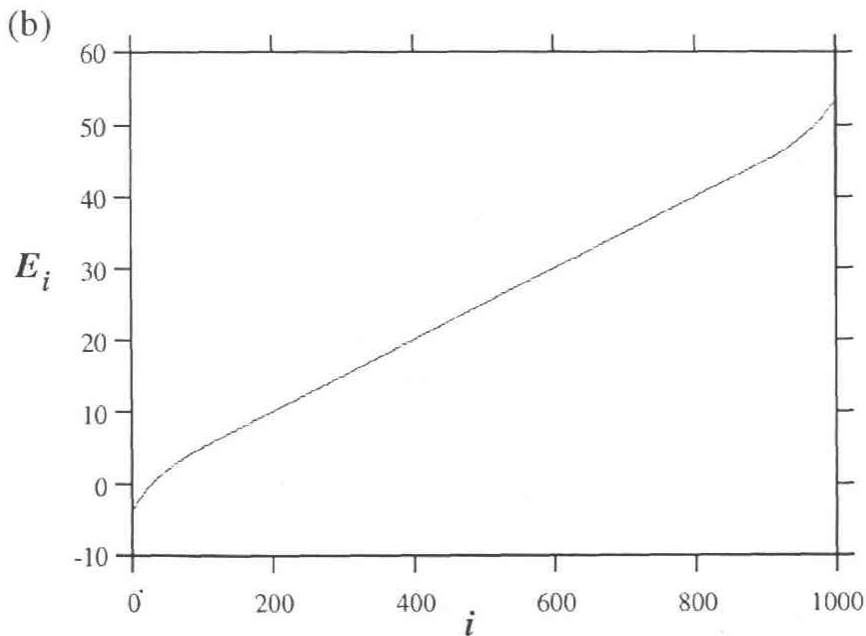
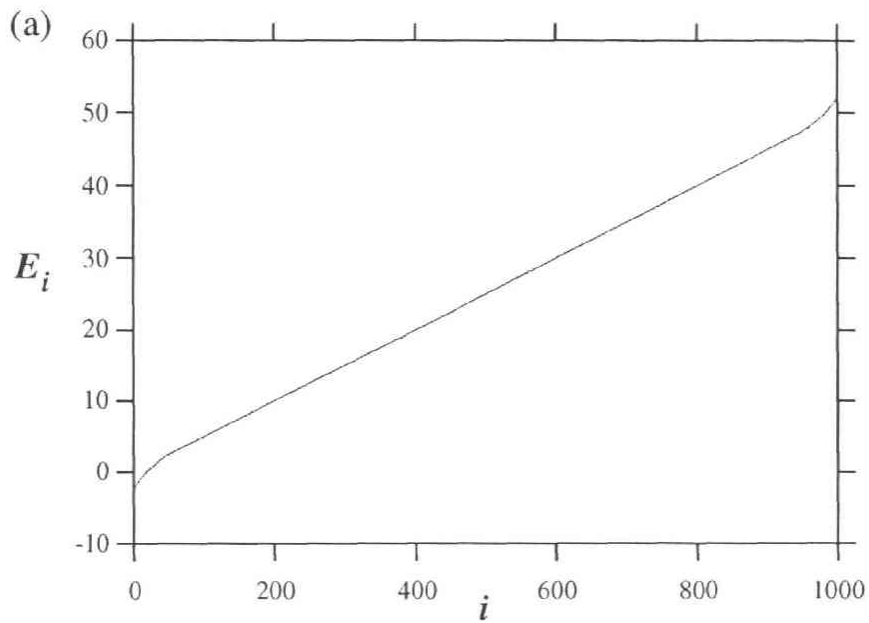


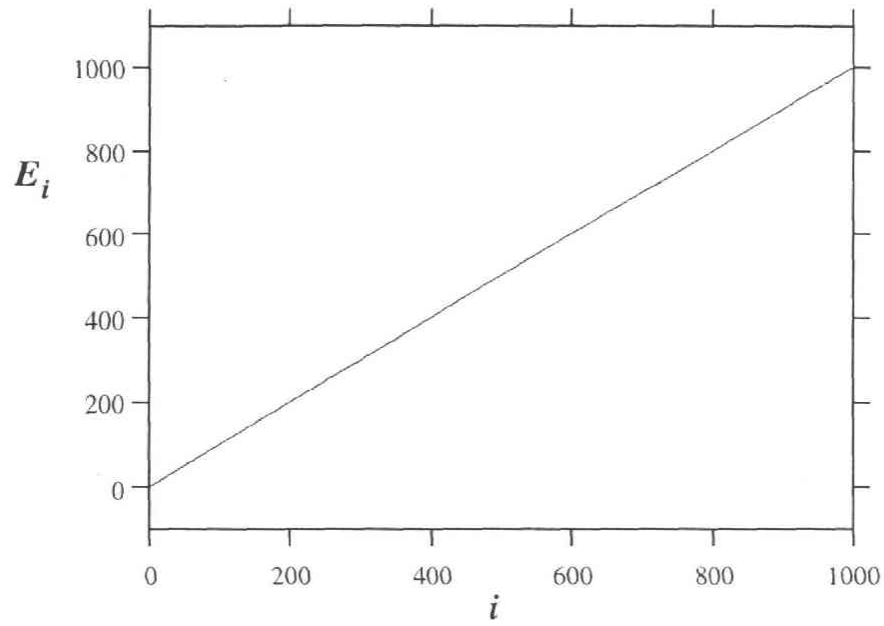
Fig. 3.2 一様電場下の準周期系のエネルギー準位

例．ハーバーモデル（ $V = 0.4$ ， $F = 0.05$ ）の場合，この精度では直線的变化を示しており，勾配から平均間隔が電場の強さ  $F = 0.05$  となっていることが分かる．

この図の精度の範囲内ではエネルギー準位は直線的変化を示していることが分かる。直線の勾配から、エネルギー準位の平均間隔が電場の強さ  $F$  となっていることが確認できる。ここで、両端で直線からはずれている部分が見られるがこれは端の影響の現われであり、このグラフからも端の影響を見積もることができる。ハーバーモデルとフィボナッチ格子について、いくつかのパラメタに対するエネルギー準位を Fig. 3.3 に示した。



(c)



(d)

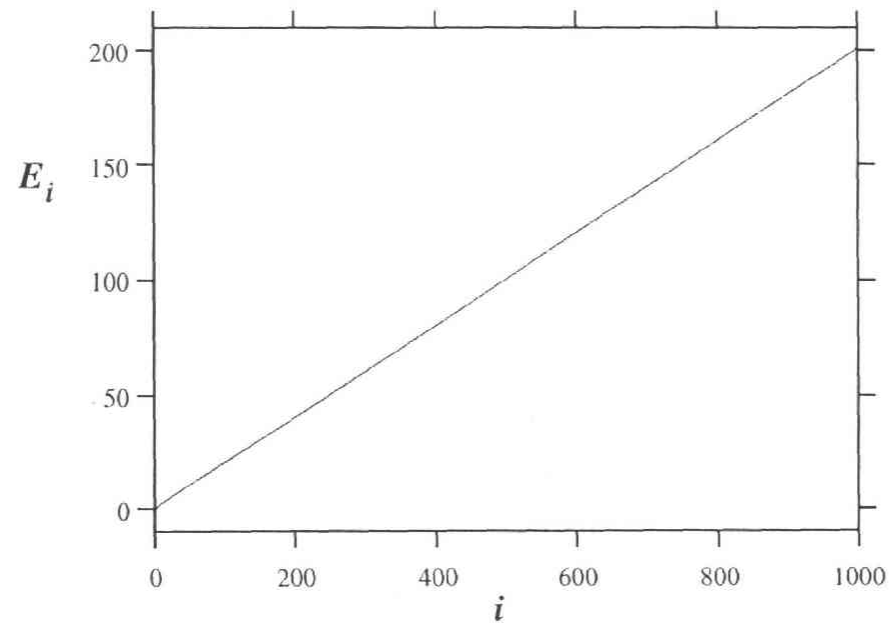


Fig. 3.3 一様電場下の準周期系のエネルギー準位 (いくつかのパラメタ)  
定性的性質はモデル, パラメタによる大きな違いはない. 平均準位間隔は  $F$  であることが分かる.

ハーバーモデル: (a)  $V=1.0$ , (b)  $V=2.0$ . それぞれ  $F=0.05$ .

フィボナッチ格子: (c)  $F=1.0$ , (d)  $F=0.2$ . それぞれ  $V=1.0$ .

ハーバーモデルの場合もフィボナッチ格子の場合も先に述べたような傾向を示し、大きな違いは見られない。

このエネルギースペクトルは前章で述べたとおり非一様シュタルクラダーとなる。したがって、周期系のシュタルクラダー  $E_i = iF$  からのシフト  $\Delta_i$  があり、それは

$$\Delta_i = E_i - iF \quad (3.2)$$

によって定義される。  $V=0.4$  ,  $F=0.05$  のハーバーモデルの場合のシフト  $\Delta_i$  を番号  $i$  に対してプロットしたものが Fig. 3.4 である。

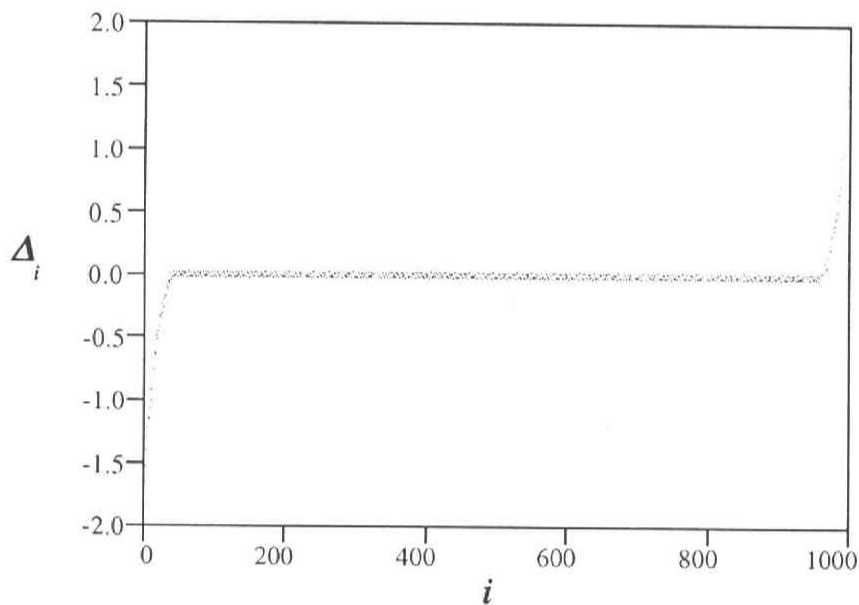


Fig. 3.4 周期系のシュタルクラダーからのシフト

$V=0.4$  ,  $F=1.0$  のハーバーモデルの場合、エネルギーの番号に対してシフト  $\Delta_i$  をプロットした。端の影響がより分かりやすくなっている。

この図からも固定端条件による端の影響を見積もることができる。シフト  $\Delta_i$  は有界な関数であると予想され、したがって  $\Delta_i$  が極端に大きいデータは端の

影響を受けていると考えられる。

次に、Fig. 3.4で端の影響を受けていない範囲のデータを拡大してみたものがFig. 3.5である。

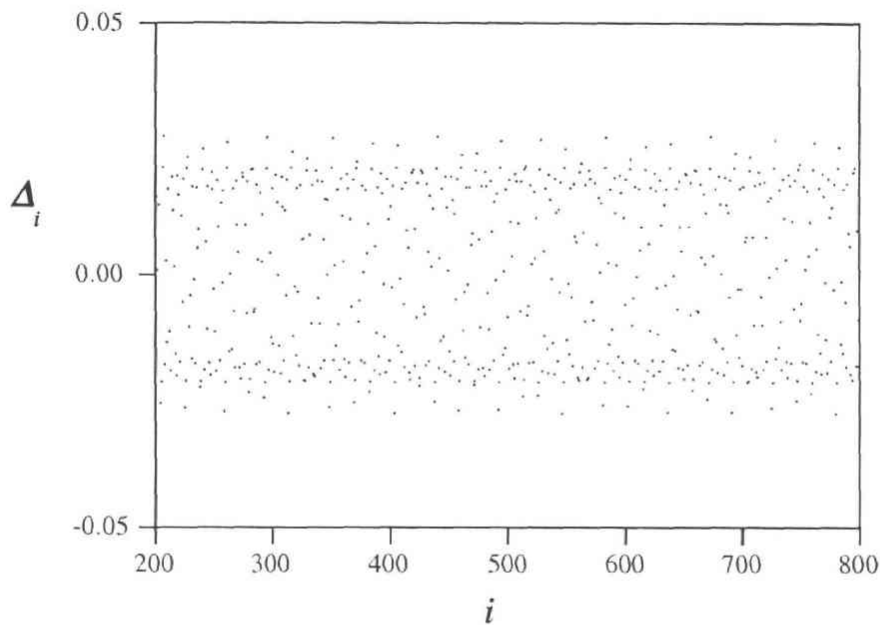


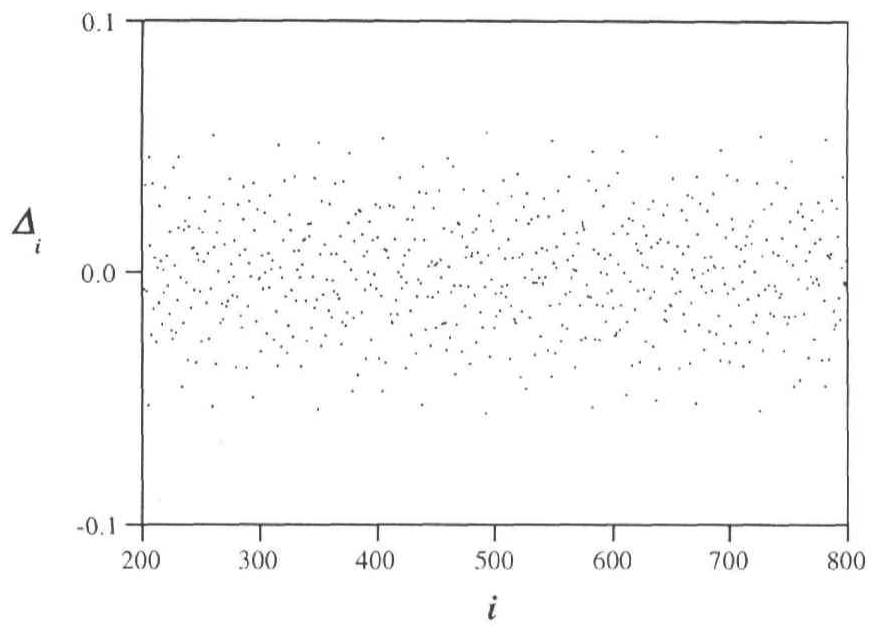
Fig. 3.5 周期系のシュタルクラダーからのシフト（拡大図）

Fig. 3.4の一部（ $i$ が200から800まで）を拡大したもの、電場  $F = 0.05$  の5割程度の揺らぎが上下にある。

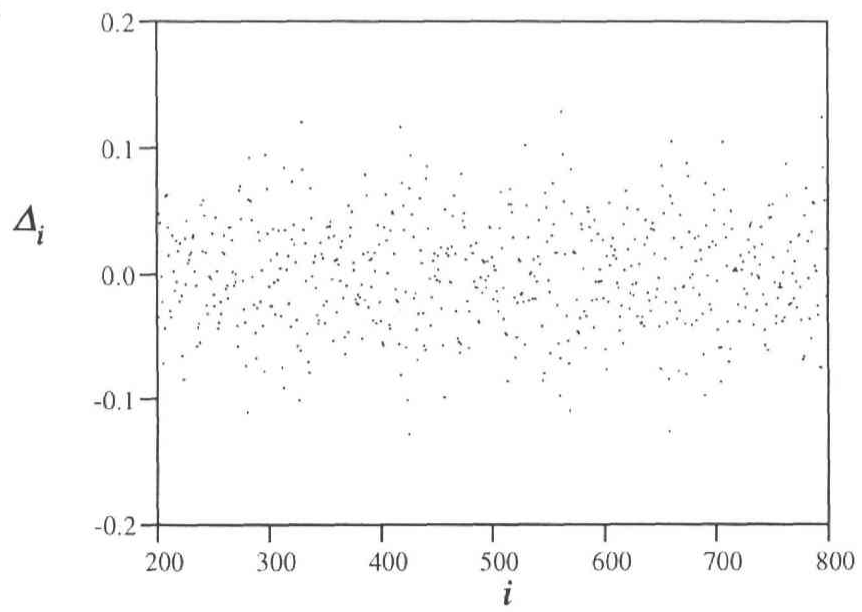
この図のパラメタでは周期系のシュタルクラダーからのシフトは上下に電場の強さの5割程度の揺らぎがあることが分かる。

次にFig. 3.6にモデル、パラメタを変えた場合のシフト  $\Delta_i$ を示した。この図から分かることは、ハーパーモデルとフィボナッチ格子では傾向が非常に異なっているということである。ハーパーモデルの場合はシフトの分布が連続的であるのに対し、フィボナッチ格子の場合には不連続でバンド構造のようなものが見える。また、同じモデルでもパラメタの違いによって様子が異なっていることも分かる。

(a)



(b)



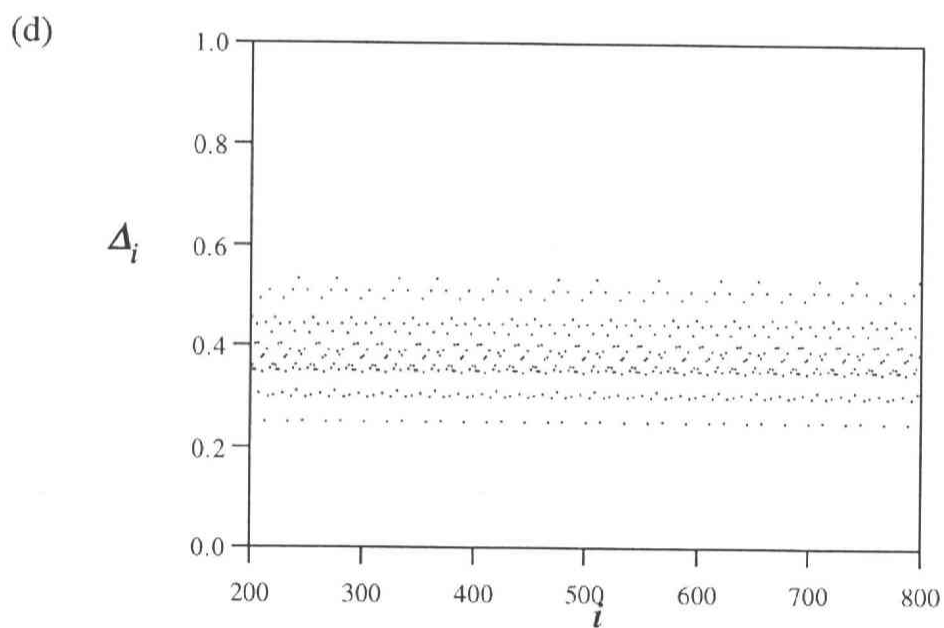
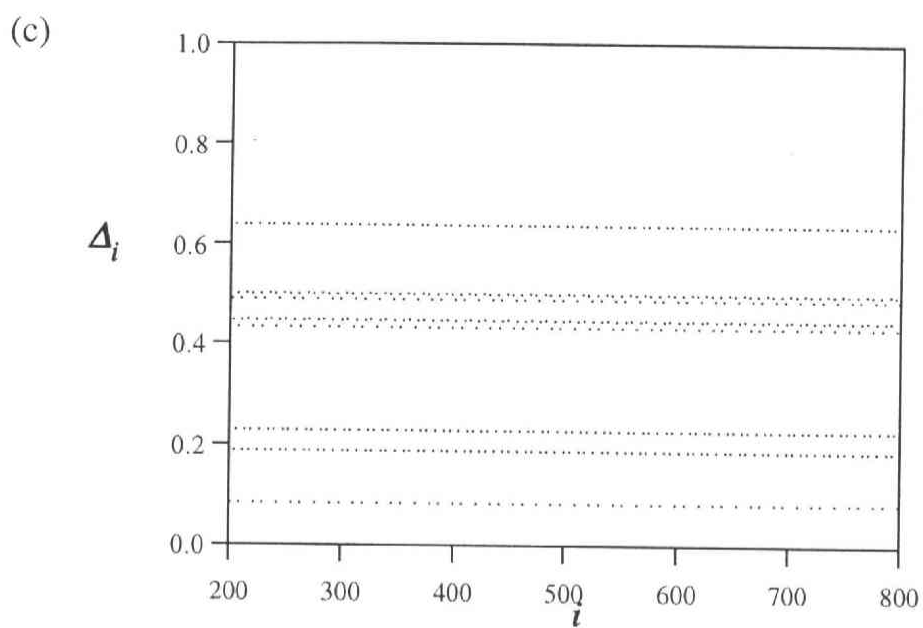


Fig. 3.6 周期系のシュタルクラダーからのシフト (いくつかのパラメタ)  
モデル, パラメタによって非常に異なった振る舞いをしている. 特に, ハーパー  
モデルとフィボナッチ格子では傾向が著しく異なる.

ハーパーモデル: (a)  $V = 1.0$ , (b)  $V = 2.0$ . それぞれ  $F = 0.05$ .

フィボナッチ格子: (c)  $F = 1.0$ , (d)  $F = 0.2$ . それぞれ  $V = 1.0$ .

前章で考察したように、シフト  $\Delta_i$  はその準位の波動関数の局在領域での変調ポテンシャルの値に影響を受けていると考えられる。波動関数はエネルギー準位の番号  $i$  とともに平均的には 1 格子ずつ右にずれるが、変調ポテンシャルは周期  $1/\omega$  である。したがって、シフト  $\Delta_i$  は番号  $i$  に関して周期  $1/\omega$  の変調を受けていると期待される。もしシフト  $\Delta_i$  がこのような変調を受けているとすれば、周期 1 の周期関数  $g(x)$  を用いて

$$\Delta_i = g(i\omega) \quad (3.2)$$

と表される。 $g(x)$  は準位間隔の平均からのシフトの変調を表わす関数であるが以下では単に変調関数と呼ぶことにする。

ここで、 $\{i\omega \bmod 1 \mid i \in \mathbb{Z}\}$  が区間  $[0, 1)$  で密であること及び  $g(x)$  の周期が 1 であることから、 $i$  について十分多くのデータをとれば変調関数  $g(x)$  は  $g(i\omega)$  vs.  $i\omega \bmod 1$ ，すなわち  $\Delta_i$  vs.  $i\omega \bmod 1$  によって再現することができる。 $V=0.4$ ， $F=0.05$  のハーバーモデルの場合に実際に計算した  $\Delta_i$  の値から変調関数  $g(x)$  を再現した結果が Fig. 3.7 である。

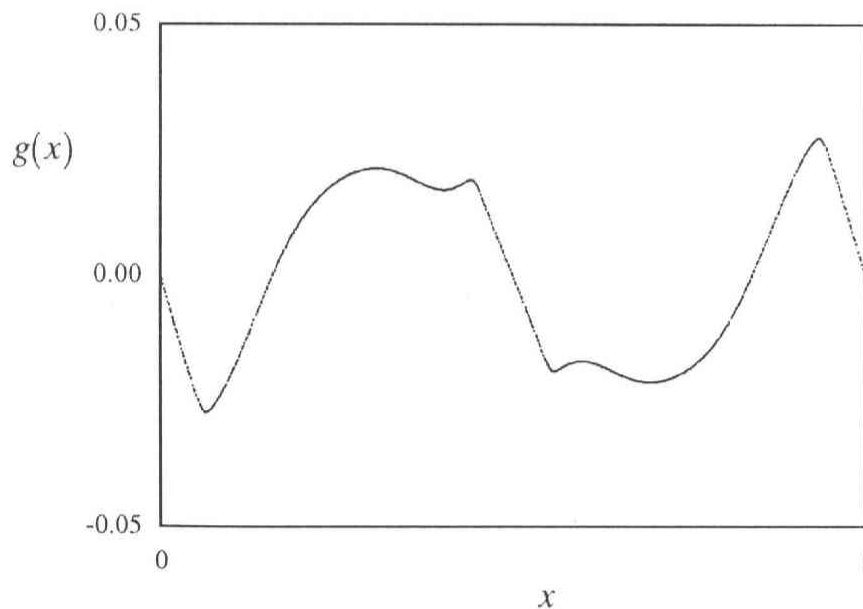


Fig. 3.7 準位間隔の平均からのシフトの変調を表わす変調関数  $g(x)$

$\Delta_i$  vs.  $i\omega \bmod 1$  によって再現した結果、一つの明確な関数が浮き上がった。

ハーバーモデル： $V=0.4$ ， $F=0.05$  の場合。



データ数は 600 個程とっているなので区間  $[0, 1)$  で十分密であり，確かに 1 つの関数が再現されていることが分かる．同様にしてモデル，パラメタを変えたときの変調関数  $g(x)$  を Fig. 3.8 に示した．

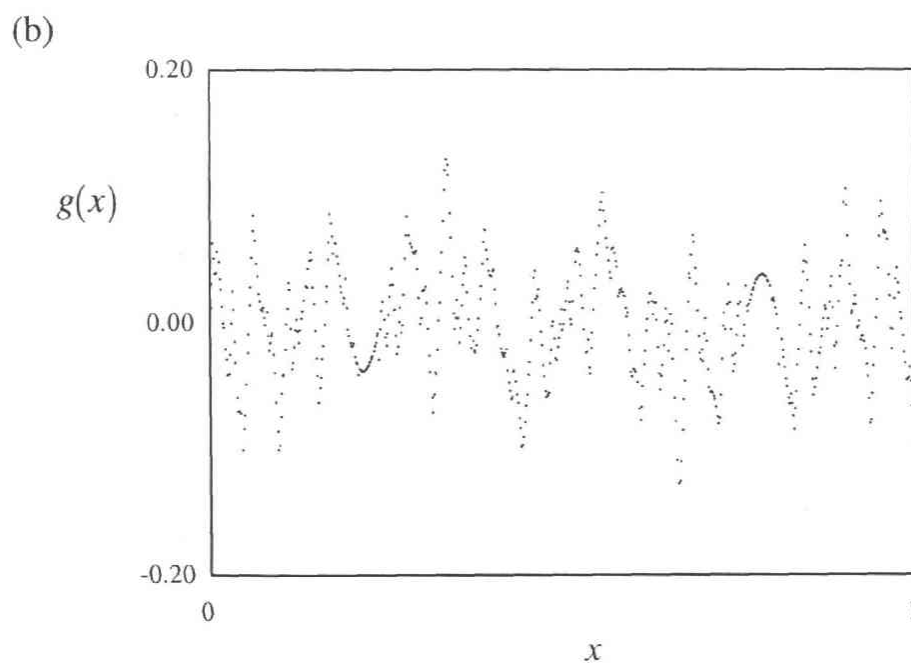
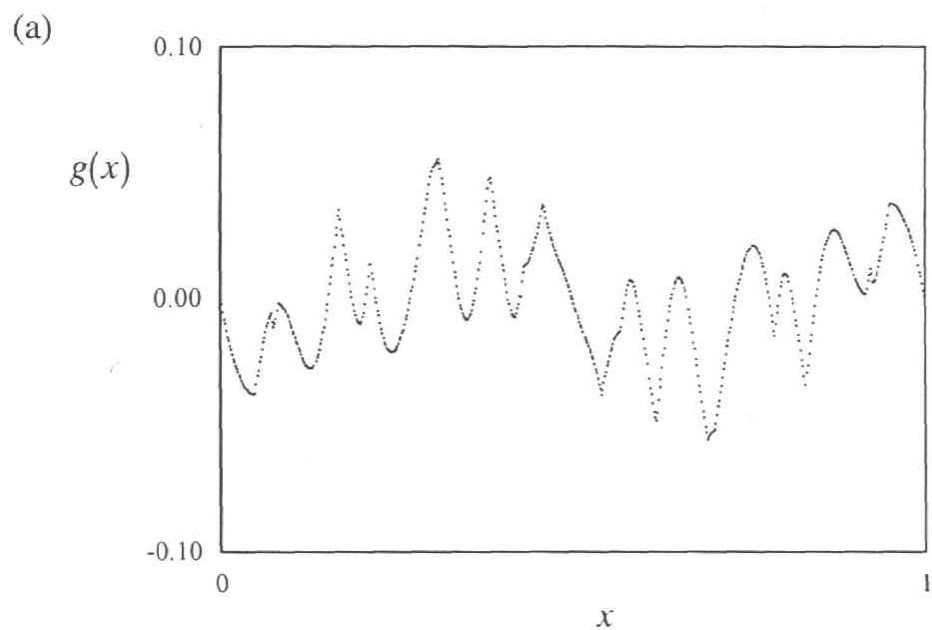


Figure 1 shows a plot of the function  $g(x)$  versus  $x$ . The x-axis is labeled  $x$  and ranges from 0 to 1. The y-axis is labeled  $g(x)$  and ranges from 0.0 to 0.7. The function is a step function with the following values:

$x$ interval	$g(x)$ value
$[0, 0.25]$	0.19
$[0.25, 0.4]$	0.09
$[0.4, 0.55]$	0.24
$[0.55, 0.65]$	0.45
$[0.65, 0.75]$	0.44
$[0.75, 0.85]$	0.64
$[0.85, 0.95]$	0.49
$[0.95, 1.0]$	0.50

$\Delta_i$  vs.  $i\omega \bmod 1$ によって再現した結果, やはり一つの明確な関数が浮き上がっている.

フィボナッチ格子: (c)  $F = 1.0$ , (d)  $F = 0.2$ . それぞれ  $V = 1.0$ .

- 49 -

このように変調関数  $g(x)$  が明確に定義できるということは各準位が変調関数  $g(x)$  に従う準周期的変調を受けていることにはかならない。しかも、その周期は変調ポテンシャルの周期と等しく  $1/\omega$  である。ここでの解析の結果、非一様シュタルクラダーは準周期系の場合には、準周期的シュタルクラダーであることが結論できる。ランダム系ではこのような変調関数  $g(x)$  を定義することができないので、変調関数  $g(x)$  はランダム系と準周期系との区別を明確にするものである。

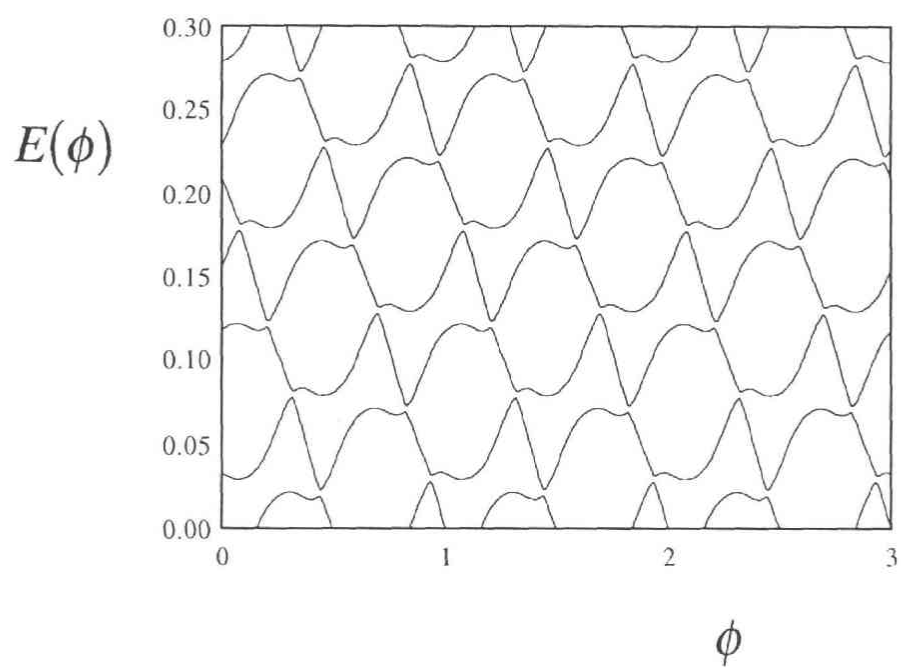
#### (b) 2次元ワニエシュタルクラダー (2DWSL)

エネルギー準位を適当な規則に従って（例えば大きさの順に）番号付けし、ハミルトニアンの位相依存性を考慮に入れて位相  $\phi$  の関数として  $E_i(\phi)$  と書くことにする。これに対応する規格化された固有関数を、同様に位相依存性を考慮に入れて  $\Psi_i(\phi)$  と書くことにするとシュレーディンガー方程式は

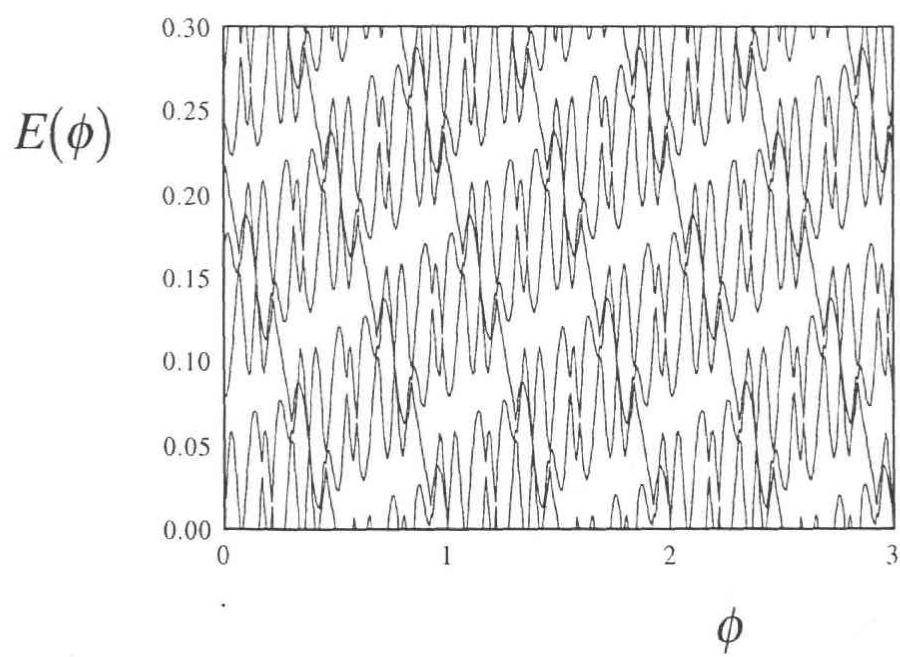
$$H(\phi)\Psi_i(\phi) = E_i(\phi)\Psi_i(\phi) \quad (3.3)$$

となる。エネルギースペクトル  $\sigma$  はエネルギー準位  $E_i(\phi)$  全体の集合であるが、電場がない場合と異なって位相  $\phi$  に依存する。そこで  $\phi$  依存性を  $\sigma(\phi)$  と明示的に表わせば、エネルギースペクトルは  $\sigma(\phi) = \{E_i(\phi) \mid i \in \mathbb{Z}\}$  と書くことができる。  $\sigma(\phi)$  は  $\phi$  vs.  $E$  平面上で2次元のパターンを描くので、これを2次元ワニエシュタルクラダー（以下 2DWSL）と呼ぶことにする。本研究で取り上げた二つのモデルの 2DWSL をいくつかのパラメータに対して示したものが Fig. 3.9 である。(a)(b)(c) はハーパーモデルの場合、(d)(e) はフィボナッチ格子の場合の 2DWSL である。2DWSL はハーパーモデルとフィボナッチ格子では非常に異なった振る舞いをする。また、各々のモデルにおいてもパラメータの変化に伴って非常に複雑に変化する。

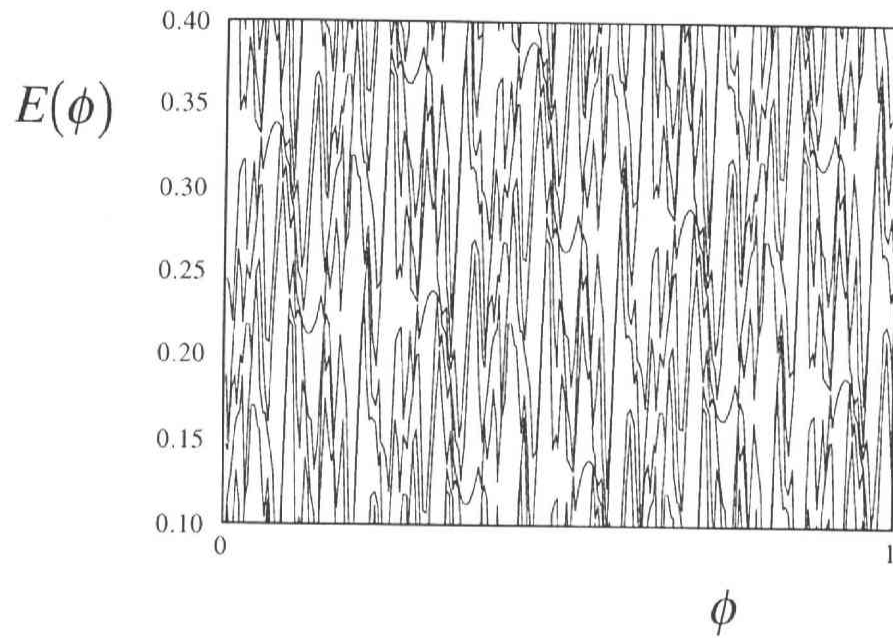
(a)



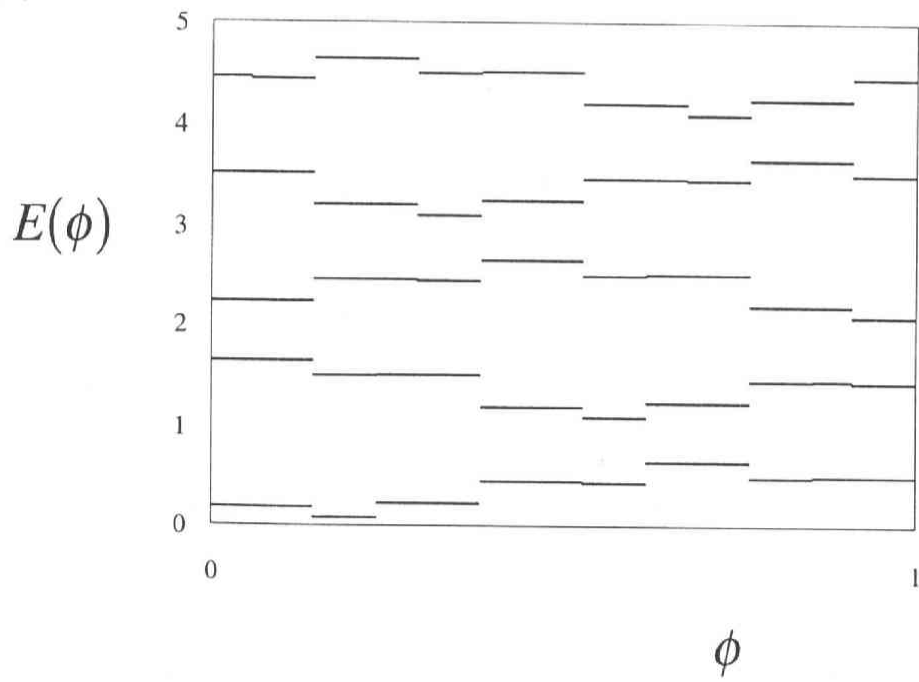
(b)



(c)



(d)



(e)

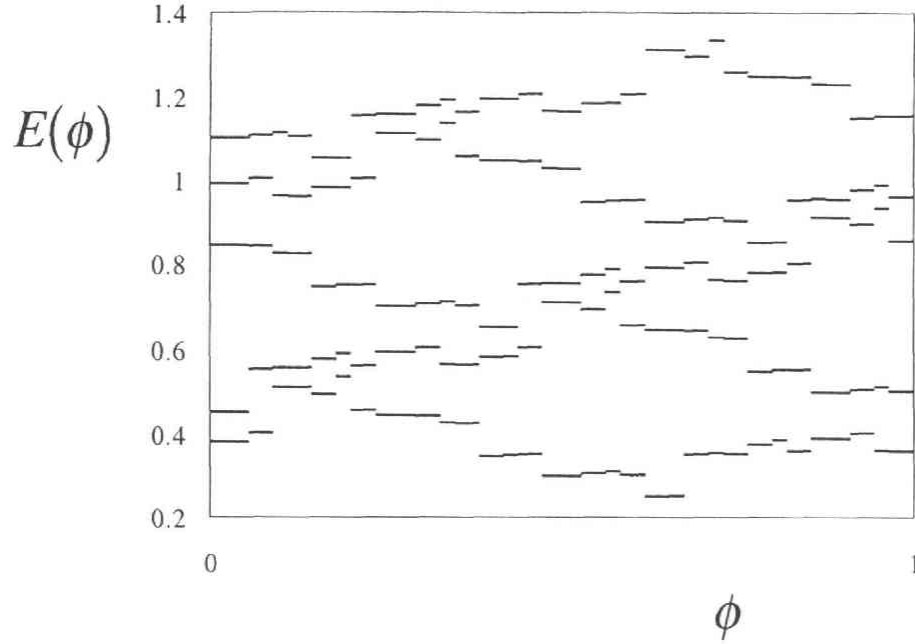


Fig. 3.9 2次元ワニエシタルクラダー (2DWSL)

エネルギースペクトルは  $\phi$  vs.  $E$  平面上で2次元のパターンを描く. ここでもハーバーモデルとフィボナッチ格子とで非常に異なる性質があることが分かる.

ハーバーモデル: (a)  $V=0.4$ , (b)  $V=1.0$ , (c)  $V=2.0$ . それぞれ  $F=0.05$ .

フィボナッチ格子: (d)  $F=1.0$ , (e)  $F=0.2$ . それぞれ  $V=1.0$ .

2DWSL は横軸  $\phi$  を固定してエネルギー準位を見ると非一様 WSL となる. また, 番号  $i$  を固定して一つの準位を追うことで得られる関数  $E_i(\phi)$  は, 1次元の分散関係と考えられる. (Fig. 3.10)

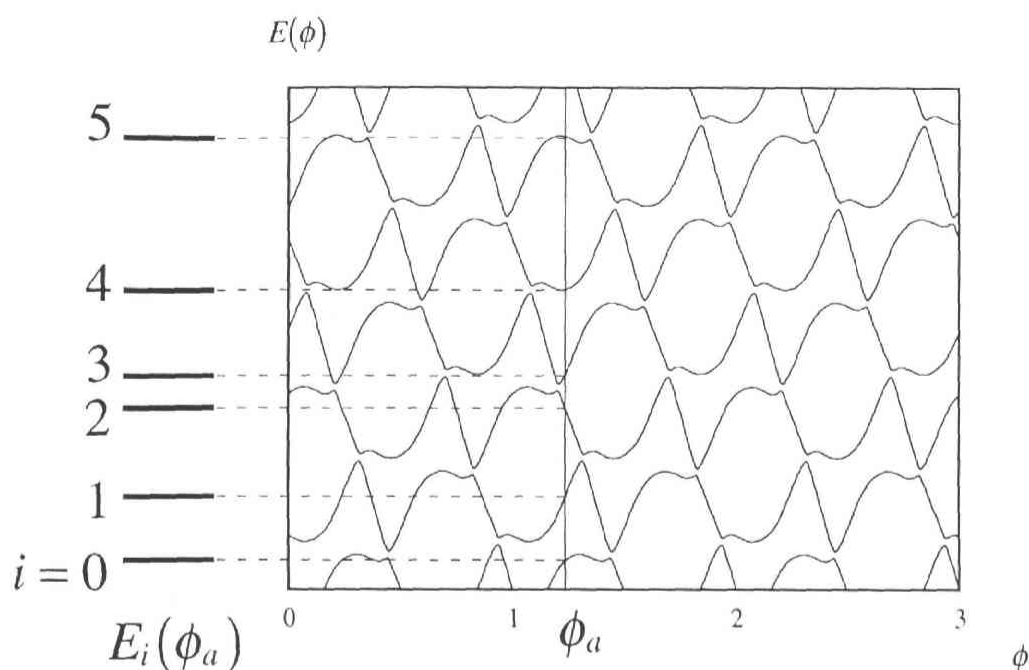


Fig. 3.10 2DWSL と準周期的シュタルクラダー

2DWSL を位相  $\phi_a$  で切った断面が準周期的シュタルクラダーとなる。

### (c) ハミルトニアンの解析的性質

このような複雑な振る舞いをする 2DWSL の構造を解明するために、ハミルトニアンの解析的性質を考察する。

(3.1) 式で与えられる系のハミルトニアンに含まれる変調ポテンシャルは  $\phi$  に関して周期が 1 である。したがって、ハミルトニアンも同様に  $\phi$  に関して周期が 1 である。すなわち

$$H(\phi+1)=H(\phi) \quad (3.4)$$

である。これは電場が加わる前のハミルトニアンの性質 (2.3) 式と同じである。

一方、系を 1 格子定数だけ平行移動すると全ての状態は電場の強さ  $F$  だけ底あげされ、さらに変調ポテンシャルの位相が  $\omega$  だけずれる。このような位相依存性は周期系と準周期系との大きな違いであり、非常に重要な性質である。このことは、1 格子定数だけの平行移動を表わす演算子  $U = \sum_n |n+1\rangle\langle n|$  を用いて

ハミルトニアンが

$$U^{-1}H(\phi)U = H(\phi + \omega) + F \quad (3.5)$$

のように変換されることにより示される．(2.4)式と比べるとこちらの関係式には電場の寄与が入っている．二つの変換(3.4)式と(3.5)式からエネルギースペクトル  $\sigma(\phi)$  の持つ二つの関係式

$$\sigma(\phi+1) = \sigma(\phi) \quad (3.6)$$

$$\sigma(\phi) = \sigma(\phi + \omega) + F \quad (3.7)$$

が結論される．2番目の関係式はエネルギースペクトルがハミルトニアンのユニタリ変換で不変であることを考慮することによって導かれる．したがって，2DWSL は2次元の周期性を持ちその周期を示す二つの基本並進ベクトルは， $t_1 = (1, 0)$ ， $t_2 = (-\omega, F)$  である．Fig. 3.11 にハーバーモデルの  $F = 0.05$ ， $V = 0.4$  の場合を例として2DWSL内に二つの基本並進ベクトルを示した．

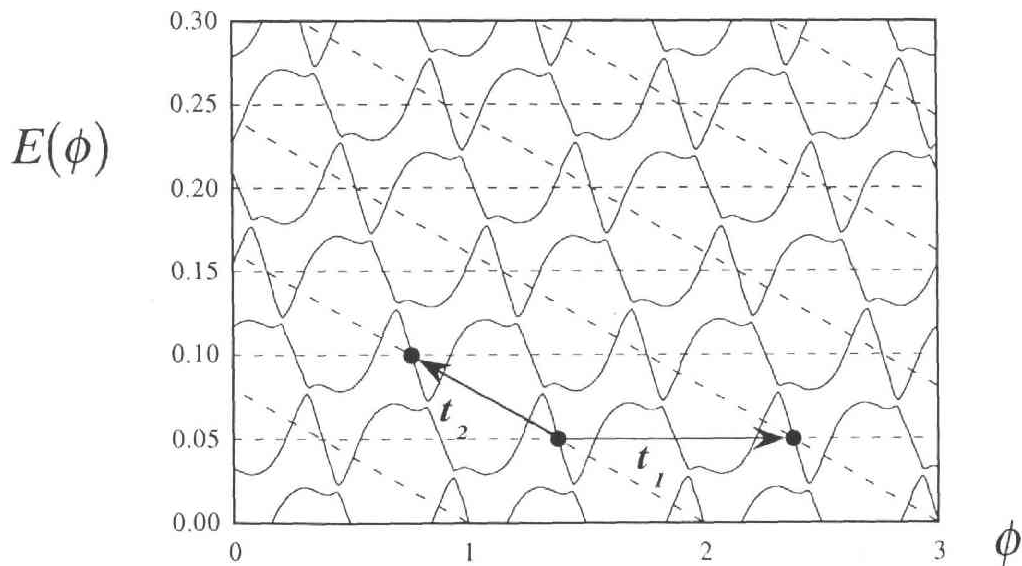


Fig. 3.11 2DWSL の2次元周期性と基本並進ベクトル

2DWSL は2次元の周期性を持つ，その周期性を示す二つの基本並進ベクトルは  $t_1 = (1, 0)$ ， $t_2 = (-\omega, F)$  である．



また、各準位  $E_i(\phi)$  をエネルギーの大きさの順に番号付けるならば、(3.6) 式と (3.7) 式から全ての  $i$  に対して次の二つの関係式

$$E_i(\phi+1) = E_{i+m}(\phi) \quad (3.8)$$

$$E_i(\phi) = E_{i-n}(\phi+\omega) + F \quad (3.9)$$

を満たす整数  $m, n$  が存在することが言える。さらに、 $V=0$  の極限（周期系）で  $E_i = iF$  となることとの整合性から  $m=0, n=1$  が得られる。したがって、全ての  $i$  について

$$E_i(\phi+1) = E_i(\phi) \quad (3.10)$$

$$E_i(\phi) = E_{i-1}(\phi+\omega) + F \quad (3.11)$$

が成立する。

ここで、一様電場下の波動関数は全て局在しているので波動関数の重心  $X_i(\phi)$  を定義することができる。エネルギー準位と同様にして波動関数及びその重心についても

$$\Psi_i(\phi+1) = \Psi_i(\phi) \quad (3.12)$$

$$\Psi_i(\phi) = U \Psi_{i-1}(\phi+\omega) \quad (3.13)$$

及び、

$$X_i(\phi+1) = X_i(\phi) \quad (3.14)$$

$$X_i(\phi) = X_{i-1}(\phi+\omega) + 1 \quad (3.15)$$

が成立する。さらに(3.11)式、(3.13)式、(3.15)式を再帰的に用いるとそれぞれ

$$E_i(\phi) = E_0(\phi + i\omega) + iF \quad (3.16)$$

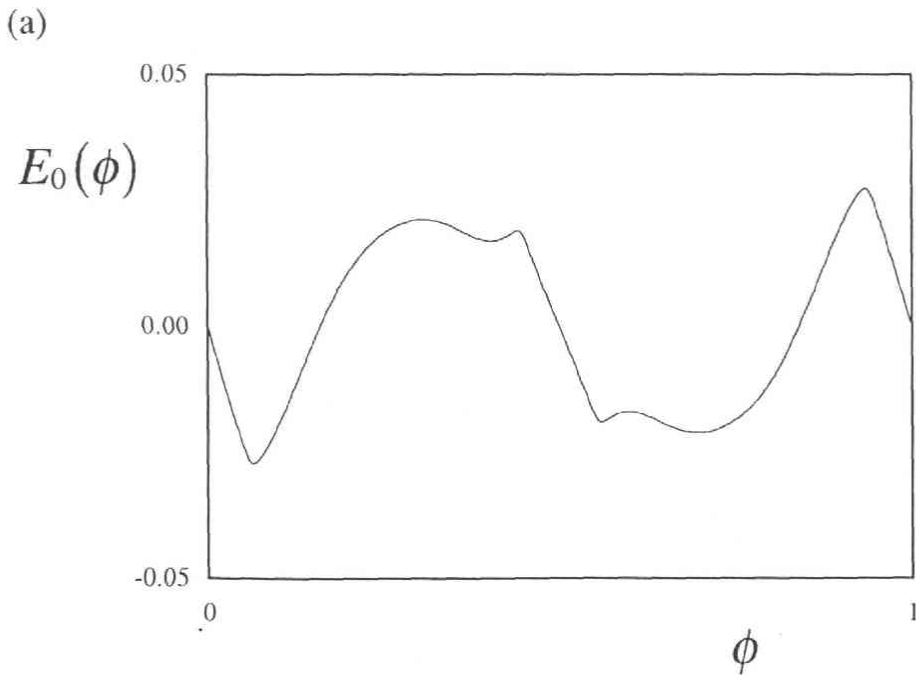
$$\Psi_i(\phi) = U^i \Psi_0(\phi + i\omega) \quad (3.17)$$

$$X_i(\phi) = X_0(\phi + i\omega) + i \quad (3.18)$$

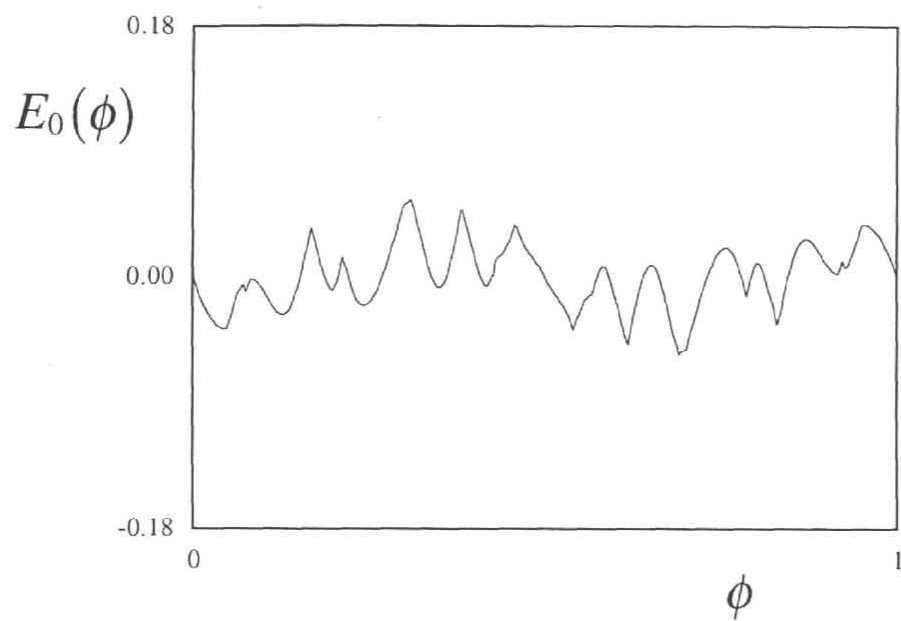
を得る.

ここで、エネルギー準位の性質について考察する.  $E_0(\phi)$  は (3.10) 式から周期 1 の周期関数であるが、 $\omega$  は無理数であるから (3.16) 式から  $E_i(\phi)$  は  $\phi$  を固定すると  $i$  に関して準周期的となる. ところで、 $E_i(\phi)$  において  $\phi$  を固定するということは 2DWSL の一つの垂直断面、すなわちエネルギースペクトルを見るということである. このことから、エネルギースペクトルが準周期的となることが分かる. 準周期的シュタルクラダーの準周期性は、2DWSL の 2 次元格子とエネルギー軸とが非整合であることとして現われてくる.

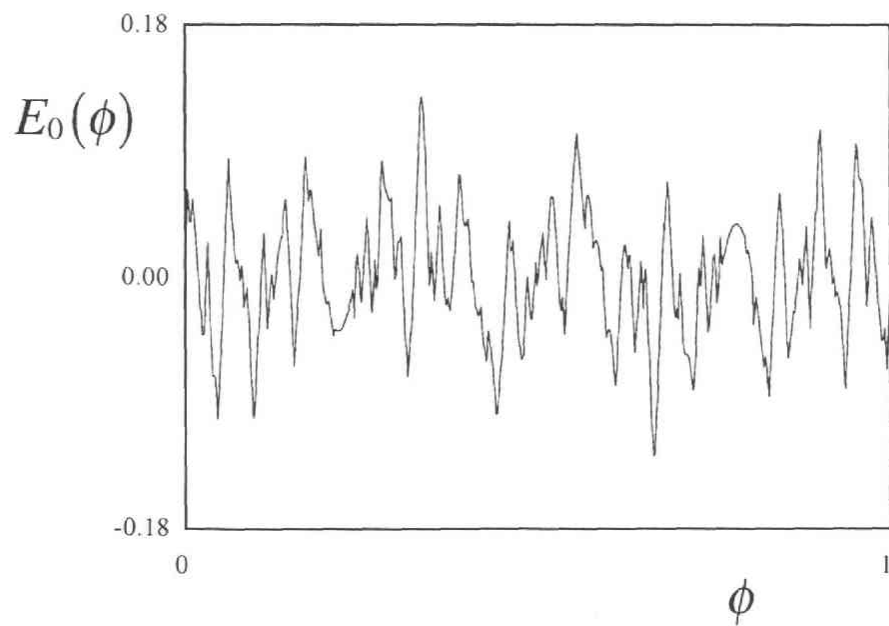
(3.16) 式の持つもう一つの重要な意味は、2DWSL がただ一つの  $E_0(\phi)$  によって完全に決定されるということである.  $E_i(\phi)$  は  $E_0(\phi)$  の単なる平行移動でしかないのである. Fig. 3.12 にハーバーモデルとフィボナッチ格子の  $E_0(\phi)$  をいくつかのパラメタについて示した.



(b)



(c)



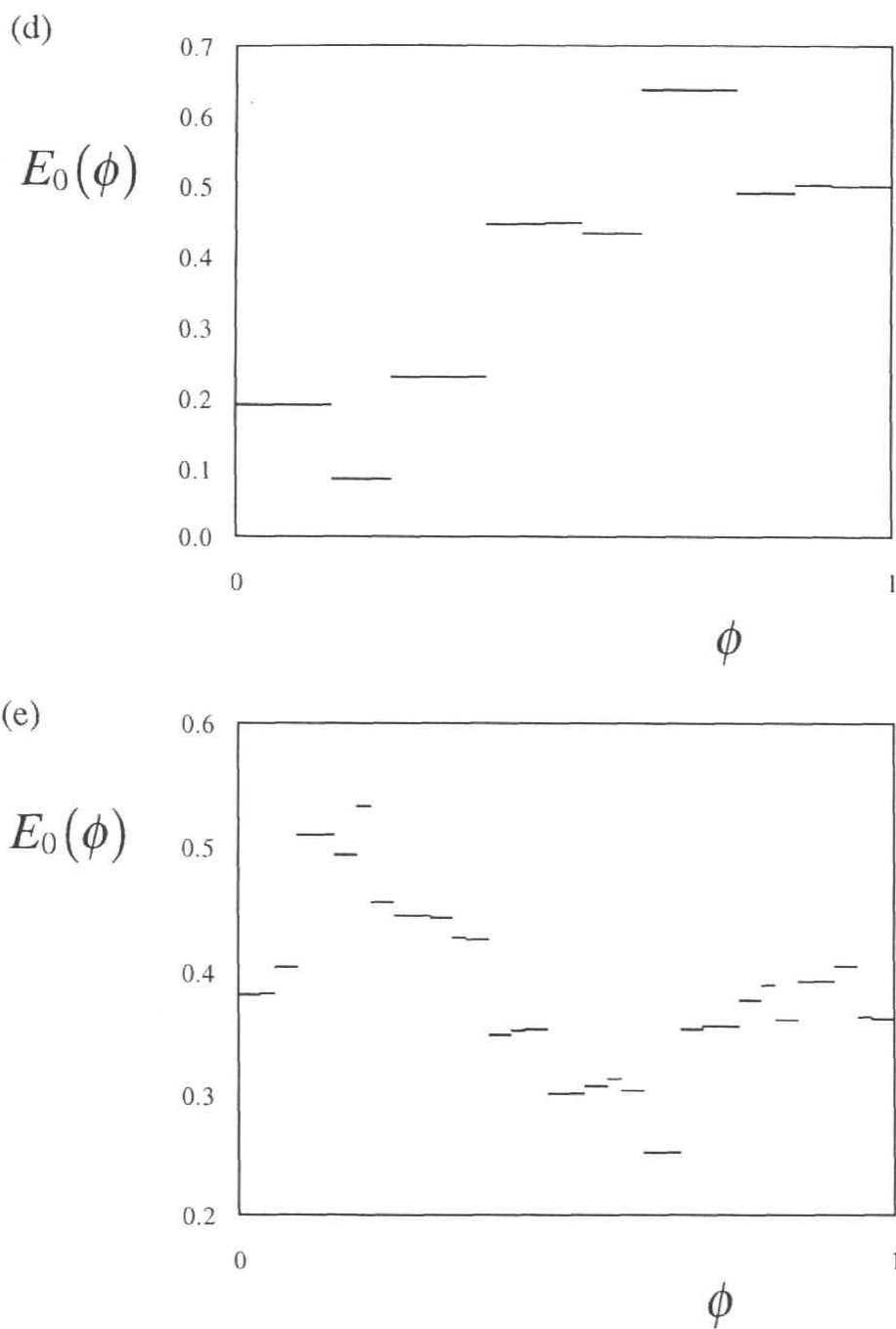


Fig. 3. 12 エネルギー準位の位相依存性

エネルギー準位の位相依存性は、実は変調関数  $g(x)$  そのものである。  
 ハーバーモデル：(a)  $V=0.4$ ，(b)  $V=1.0$ ，(c)  $V=2.0$ ．それぞれ  $F=0.05$ ．  
 フィボナッチ格子：(d)  $F=1.0$ ，(e)  $F=0.2$ ．それぞれ  $V=1.0$ ．

さて、ここで (3.16) 式を  $\phi=0$  として整理すると、

$$E_0(i\omega) = E_i(0) - iF \quad (3.19)$$

となる。この式の右辺は (3.2) 式で定義した周期系のシュタルクラダーからのシフト  $\Delta_i$  そのものである。したがって、 $E_0(\phi)$  とは変調関数  $g(x)$  の変数を位相に読み替えたもの、 $g(\phi)$  にほかならない。これはエネルギーの位相依存性  $E_0(\phi)$  が  $\phi=0$  のときのエネルギー固有値の集合から再現することができるということである。言いかえると、位相  $\phi$  とエネルギー準位の番号とに変換性があるということである。実は Fig. 3.12 における  $E_0(\phi)$  はこのようにして描いたものである。さらに Fig. 3.9 の 2DWSL の図も、このようにして得られた  $E_0(\phi)$  の図を (3.16) 式にしたがって単に平行移動して構成したものなのである。

同様なことは波動関数及びその重心についても言える。各々に対して (3.19) 式に相当する式は

$$\Psi_0(i\omega) = U^{-i} \Psi_i(0) \quad (3.20)$$

$$X_0(i\omega) = X_i(0) - i \quad (3.21)$$

である。番号 0 の波動関数とその重心の位相依存性は  $\phi=0$  のときのそれらの値の集合から再現することができる。

この節で示した性質は、準周期系のシュタルクラダーについて言える一般的な性質である。変調関数  $g(x)$  により準周期系はランダム系と区別することができた。また、1次元問題においてより高次の2次元の周期性を示す 2DWSL の存在はまさに準周期系特有の性質であると言える。

以下ではハーパーモデルとフィボナッチ格子の場合のそれぞれに特有の性質について詳しく述べる。

## (2) ハーパーモデルの場合

### (a) バンドの対称性<sup>28)</sup>

ハーパーモデルのエネルギー スペクトルはエネルギー軸に関して反転対称である。これは、変調ポテンシャルが原点において反転対称中心を持つためであった。いま、電場を加えることによって演算子  $F_{op}$  が導入されたが、この演算子は変調ポテンシャルの反転対称性を壊さない。 $F_{op}$  は前章で定義したユニタリー演算子  $Q$  によって  $Q^{-1}F_{op}Q = -F_{op}$  と変換されるからである。したがって、(2.11)式に相当する式

$$Q^{-1}H(\phi)Q = -H(-\phi) \quad (3.22)$$

が得られ、エネルギー スペクトル  $\sigma(\phi)$  は

$$\sigma(\phi) = -\sigma(-\phi) \quad (3.23)$$

を満たす。したがって、 $\sigma(\phi)$  すなわち 2DWSL は  $\phi = 0$  でエネルギー軸 ( $E=0$ ) 上に反転対称中心を持つ。また、(3.23)式で  $\phi$  を  $1/2 - \phi$  に置き換えると、

$$\begin{aligned} \sigma(1/2 - \phi) &= -\sigma(\phi - 1/2) \\ &= -\sigma(1/2 + \phi) \quad (\because \sigma(\phi + 1) = \sigma(\phi)) \end{aligned} \quad (3.24)$$

となり、2DWSL は  $\phi = 1/2$  においてもエネルギー軸上に反転対称中心を持つことが分かる。2DWSL は 2次元の並進対称性を持つことから、ユニットセルあたりさらに二つの反転対称中心があることになる。2DWSLは結局ユニットセルあたり四つの反転対称中心を持つ。Fig. 3.13 に  $F = 0.05$  ,  $V = 0.4$  の場合の 2DWSL を示した。破線は 2DWSL の 2次元格子を示している。一つのユニットセルに対する四つの反転対称中心を黒丸で示した。

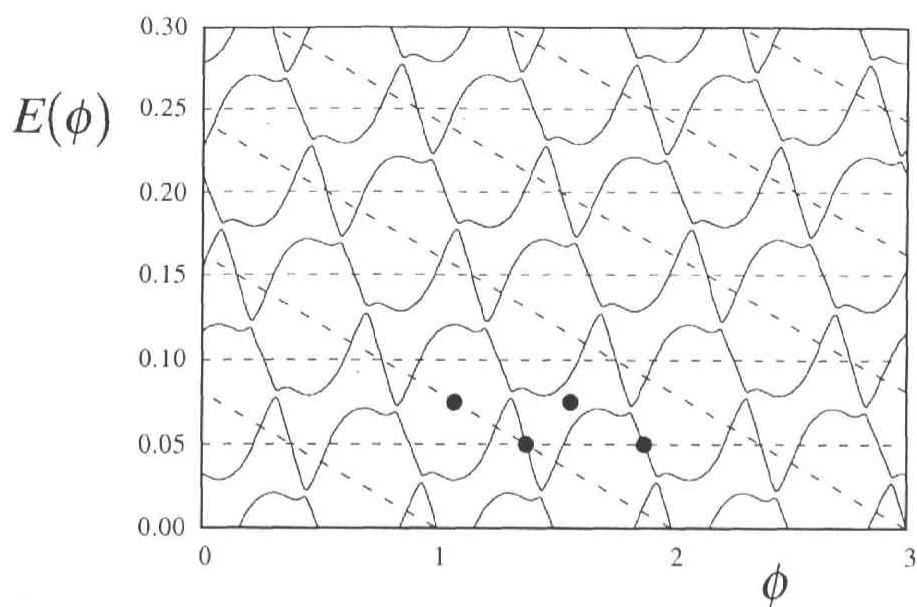


Fig. 3.13 2DWSL の反転対称中心

破線は 2 次元の格子を示している，一つのユニットセルに対する反転対称中心を黒丸で示した．

また，大きさの順に番号付けした場合のエネルギーの位相依存性を  $E_0(\phi)$  とすると (3.23) 式から

$$E_i(\phi) = -E_{i+m}(-\phi) \quad (3.25)$$

を満たす整数  $m$  が存在するが， $V = 0$  とした周期系でのエネルギースペクトルが  $E_i = iF$  であることから， $m = -2i$  と求められる．したがって，

$$E_i(\phi) = -E_{-i}(-\phi) \quad (3.26)$$

を満たす． $i = 0$  とすれば， $\phi = 0$  でエネルギー軸上に反転対称中心があることが分かる．また，(3.26) 式の  $\phi$  を  $1/2 - \phi$  に置き換え (3.10) 式を使うと， $\phi = 1/2$  でもエネルギー軸上に反転対称中心があることが分かる． Fig. 3.14 に

$V = 0.4$  ,  $F = 0.05$  の場合について  $E_0(\phi)$  の反転対称中心を示した.

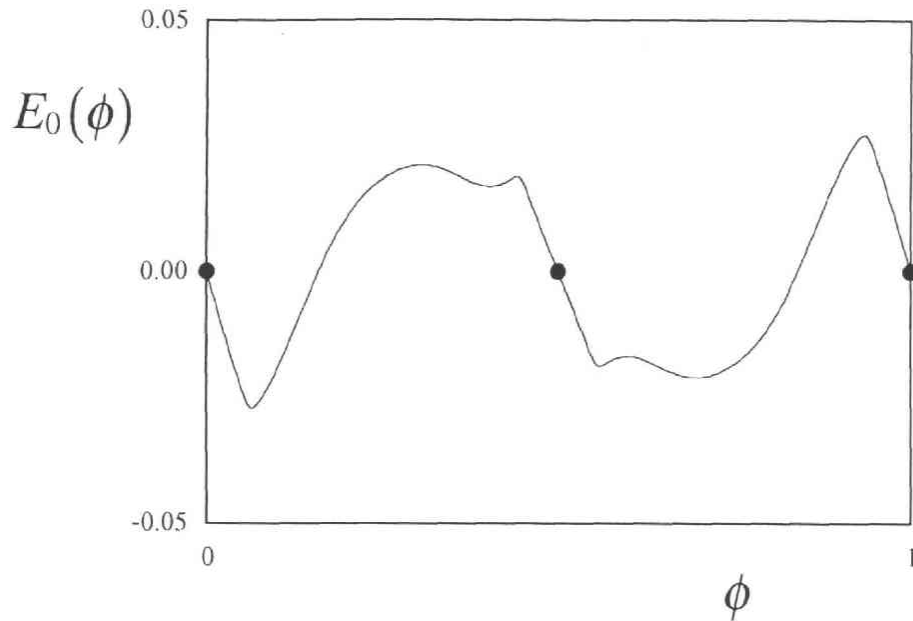


Fig. 3. 14 エネルギー準位の位相依存性の反転対称中心

変調ポテンシャルの振幅  $V = 0.4$  , 電場の強さ  $F = 0.05$  の場合, 反転対称中心を黒丸で示した.

(b)  $V < 1$  のときの物理的描像—ミニバンド描像とトンネル効果—<sup>28)</sup>

ここで  $V < 1$  のときの 2DWSL について考えてみる. この領域では電場がない場合に波動関数が系全体に広がっているので周期系と似たような解釈, すなわち有効ハミルトニアンによる理解が可能である. このことと準周期系のエネルギースペクトルのミニバンド構造とによって, この領域の物理的な描像を得ることができる.

前章で述べたように, 準周期系のエネルギースペクトルは電場がない場合には無限個のギャップが入り込んでバンドが際限なく分裂する (広義の fractal). しかし,  $V < 1$  の場合にはスペクトルは fat fractal であるので有限個のギャップだけが有効で, その結果系は有限個の実効的ミニバンドの集まりとなる. その個数はポテンシャルの振幅  $V$  によって決まり,  $V$  が大きくなるほど増加する. このような系に電場をかけると, それぞれのミニバンドが非一様シュタルクラ



ダーとなる (Fig. 3.15). 重率  $\xi$  のミニバンドに形成される非一様シュタルクラダーの平均間隔は  $F/\xi$  となることが期待される. このようなミニバンドが平均間隔  $1/\xi$  で分布するワニエ状態によって形成されると考えられるからである.

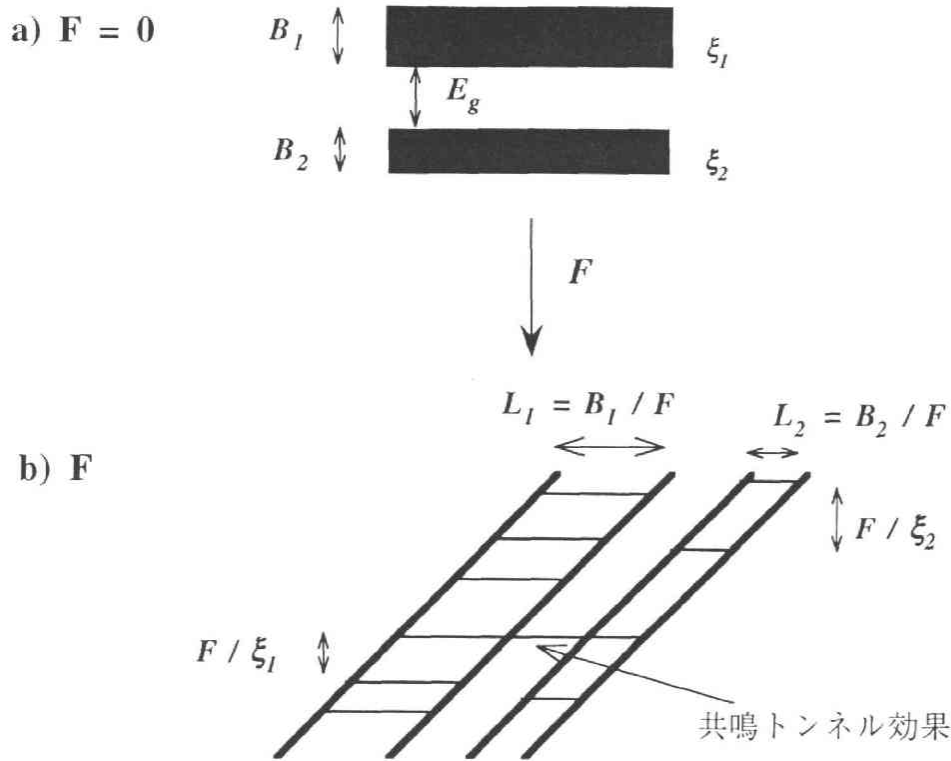


Fig. 3.15 有効なバンドの準周期的シュタルクラダーと共鳴トンネル効果  
電場がかかると重率 $\xi$ のミニバンドは平均間隔  $F/\xi$ の準周期的シュタルクラダーとなる. 隣り合うミニバンド間で準位が一致すると共鳴トンネル効果によって電子はバンド間遷移が可能となり縮退が解ける.

今隣り合う二つのミニバンドを考える. これらのミニバンド間のギャップは有限であるのでトンネル効果によって電子はバンド間を遷移することができる. このときのトンネル確率  $T$ は

$$T \propto \exp\left(-\frac{\pi}{2F} \sqrt{\frac{E_g^3}{B}}\right) \quad (3.27)$$

で与えられる<sup>29)</sup>。ここで  $F$  は電場の強さ、 $E_g$  は二つのバンド間のギャップの大きさである。また、 $B$  は電場がないときのバンド幅で二つのバンドが同じバンド幅であると仮定した場合の値である。

トンネル確率の指数部分を  $-\beta$  と置くと  $\beta$  はトンネル効果の評価の一つの指標となる。すなわち  $\beta \ll 1$  のときには電子は容易にバンド間を遷移できることになる。このとき二つのミニバンドを隔てているギャップは系のシュタルクラダーの形成には効かなくなり、二つのバンドが合併してできる大きな一つのバンドとしてシュタルクラダーが形成される。逆に  $\beta \gg 1$  のときには電子は二つのバンド間を遷移できなくなる。このとき二つのバンドはそれぞれ独立したシュタルクラダーを形成する。

ある二つのミニバンドのバンド幅  $B$  とその間のギャップの大きさ  $E_g$  は、変調ポテンシャルの振幅  $V$  の大きさによって決まる。したがって、電場  $F$  とポテンシャルの振幅  $V$  を与えたとき、この系に有効なギャップの数が決まる。電場の強さが同じなら変調ポテンシャルの振幅  $V$  が大きいほうが各々のギャップは大きくなり有効なギャップの数は増える。一方、変調ポテンシャルの振幅が同じなら電場が弱いほうがトンネルしにくくなるので、やはり有効なギャップの数は増える。こうして決まった有効なギャップに隔てられた各ミニバンドにはそれぞれ非一様シュタルクラダーが形成され、系のエネルギースペクトルはそれらの合併となるのである。したがって、変調ポテンシャルの振幅が大きいほど、また、電場が弱いほど 2DWSL は複雑になる傾向にある。

ところで、一つのギャップを挟む二つのミニバンドに形成されるシュタルクラダーの間で準位の一致が起こることがある。このようなときには、共鳴トンネル効果によって電子はバンド間遷移が可能となり縮退が解けると考えられる。したがって、2DWSL はパラメータ  $F$ 、 $V$  によって複雑に変化するのである。

### (c) ほとんど孤立したバンドのシュタルクラダーの解析的性質<sup>28)</sup>

前項で述べたように 2DWSL はいくつかの孤立したミニバンドにおける非一様シュタルクラダーの重ね合せとなる。ここでは、個々の孤立したミニバンドにおける非一様シュタルクラダーの性質を解析的に議論する。

ある孤立したミニバンドに由来する非一様シュタルクラダーを大きさの順に番号付けしたものを  $E_v^*(\phi)$  とすると、これらもまた  $\phi$  vs.  $E$  平面で2次元のパターンを描く。これを mini 2DWSL と呼ぶことにする。2DWSL は全ての有効なミニバンドに対する mini 2DWSL の重ね合せとなる。mini 2DWSL は反転対称性は失っているが、もとの 2DWSL と同じ周期を持つ。その結果、二つの関係式

$$E_v^*(\phi+1) = E_{v+m}^*(\phi) \quad (3.28)$$

$$E_v^*(\phi) = E_{v-n}^*(\phi + \omega) + F \quad (3.29)$$

を満たす整数  $n$ ,  $m$  が存在する。これらより

$$E_v^*(\phi + n - m\omega) = E_v^*(\phi) + mF \quad (3.30)$$

を得る。(3.28)式と(3.30)式とから平均準位間隔は  $F/(n - m\omega)$  であることが分かる。一方、前項での物理的な考察よりミニバンドの重率を  $\xi$  としたときの平均準位間隔は  $F' = F/\xi$  で与えられる。したがって、 $\xi = n - m\omega$  である。これは、あるミニバンドに属する mini2DWSL の位相依存性  $E_v^*(\phi)$  の変換規則(3.30)式が、そのミニバンドの指数  $[n, m]$  によって与えられることを示している。

さて、(3.30)式によると  $E_v^*(\phi)$  は  $\phi$  に関して線形項と振動項とに分けることができる。振動項を  $E'_v(\phi)$  と書くと  $E_v^*(\phi)$  は

$$E_v^*(\phi) = mF'\phi + E'_v(\phi) \quad (3.31)$$

のように表わせる。この振動項もまた、 $\phi$  vs.  $E$  平面で2次元のパターンを描く。(3.28)式～(3.30)式に(3.31)式を代入し整理すると、関係式

$$E'_v(\phi + \xi) = E'_v(\phi) \quad (3.32)$$

$$E'_v(\phi) = E'_{v-1}(\phi + \eta) + F' \quad (3.33)$$

が導かれる． $\eta$  は  $pm - qn = 1$  を満たす整数  $p, q$  を用いて  $\eta = p - q\omega$  と表わせる．また  $p/q$  ( $= |p/q|$ ) は， $\omega$  の最良有理近似の分数列で  $n/m$  の次に現れる分数に選ぶことができる．(3.32)式及び(3.33)式は mini 2DWSL も 2次元の周期をもち，その基本並進ベクトルは  $t_1 = (\xi, 0)$ ， $t_2 = (-\eta, F')$  であることを示す．ここで，(3.33)式を再帰的に用いることによって

$$E'_v(\phi) = E'_0(\phi + v\eta) + vF' \quad (3.34)$$

が求められる．したがって， $E'_v(\phi)$  は格子定数が  $1/\xi$ ，非整合比が  $\eta/\xi$  ( $= (p - q\omega)/(n - m\omega)$ ) のハーバーモデルの 2DWSL と同じ周期性を持つ．このことは，2DWSL が階層構造を持つということを意味しているが，このような階層構造は準周期系の特徴である．

分散関係  $E = E'_v(\phi)$  の平均的振る舞いは，線形項  $mF'\phi$  ( $= (mF/\xi)\phi$ ) によって近似される．線形項の勾配はそのミニバンドの重率  $\xi$  と指数  $m$  の比  $m/\xi$  で決まるので，重率が異なるミニバンドに由来する分散関係は互いに交差する．いま，隣り合う二つのミニバンドを考えると，ハーバーモデルのバンド分岐規則からこれらの重率は必ず異なるので，それらのミニバンドに由来する分散関係は必ず交差する．

$F = 0.05$ ， $V = 0.4$  の場合についてこの様子確かめてみる．Fig. 3.16 は電場がないときのエネルギースペクトルを示している．バンド構造は原点に対して対称なので，以下ではエネルギーが正の部分について考察する．この図の精度では二つのバンドギャップ  $E_{g1}$ ， $E_{g2}$  が見える．そこで，各々のギャップに対してトンネル効果を評価する．数値計算によって求めた  $B_1 \approx 0.375$ ， $B_2 \approx 0.18$ ， $E_{g1} \approx 0.36$ ， $E_{g2} \approx 0.03$  という値から二つのバンドギャップ  $E_{g1}$ ， $E_{g2}$  に対する  $\beta$  が 11.0685，0.3768 と求められた．ギャップ  $E_{g1}$  については  $\beta \gg 1$  である

ので有効なギャップであり，逆にギャップ  $E_{g2}$  は  $\beta \ll 1$  なので無視できるギャップであることが分かる．したがって，有効なバンドは  $E_{g1}$  によって分かれた三つのバンド A, B, C（重率は各々  $\omega^2$ ,  $\omega^3$ ,  $\omega^2$ ，ミニバンドの指数  $m$  は 1, -1, 1）となることが分かる．

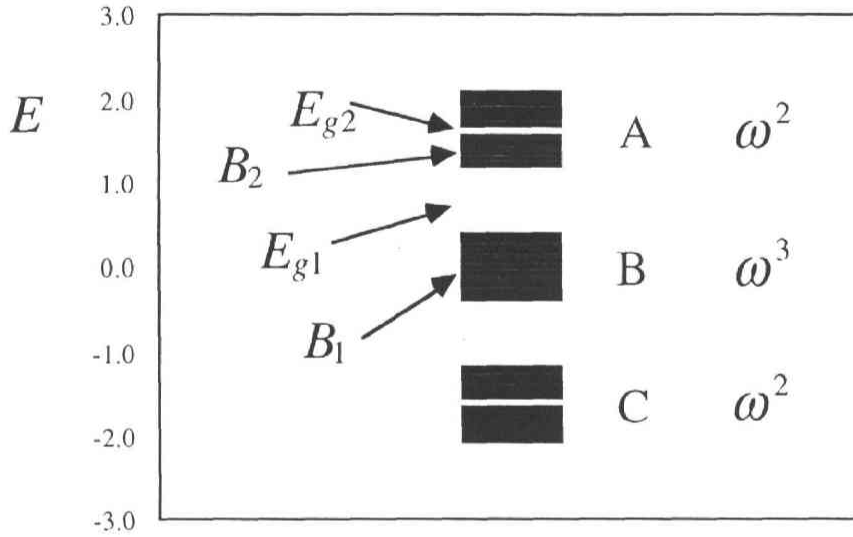


Fig. 3. 16  $V=0.4$  の場合のエネルギースペクトル

この図の精度では二つのバンドギャップ  $E_{g1}$ ,  $E_{g2}$  が見える． $F=0.05$  の場合について各々のトンネル確率を計算すると  $E_{g1}$  は有効なギャップであり  $E_{g2}$  は無視できるギャップであることが分かる．したがって，有効なバンドは  $E_{g1}$  によって分かれた三つのバンド A, B, C（重率は各々  $\omega^2$ ,  $\omega^3$ ,  $\omega^2$ ）となる．

Fig. 3. 17 にこのパラメタの場合の 2DWSL を示した．それぞれの mini 2DWSL は  $F/\omega^2$ ,  $-F/\omega^3$ ,  $F/\omega^2$  の勾配を持つ．図の破線はこの勾配を示したもので，Fig. 3. 16 のバンドの名前に対応した記号を付してある．各ミニバンドに由来する非一様シュタルクラダーは，準周期的な変調をうけているが平均間隔はそれぞれ  $F/\omega^2$ ,  $F/\omega^3$ ,  $F/\omega^2$  となっている．この三つのミニバンドの非一様シュタルクラダーの合併が全体の 2DWSL となっている．また，異なる勾配を持つものは互いに交差する．今の場合，真ん中のミニバンドと両側のミニバンドは互いに交差する．交差したところでは，共鳴トンネル効果により縮退が解ける．

Fig. 3. 17 でも交差したところで縮退が解け組み替えが起こっている様子が見られる。

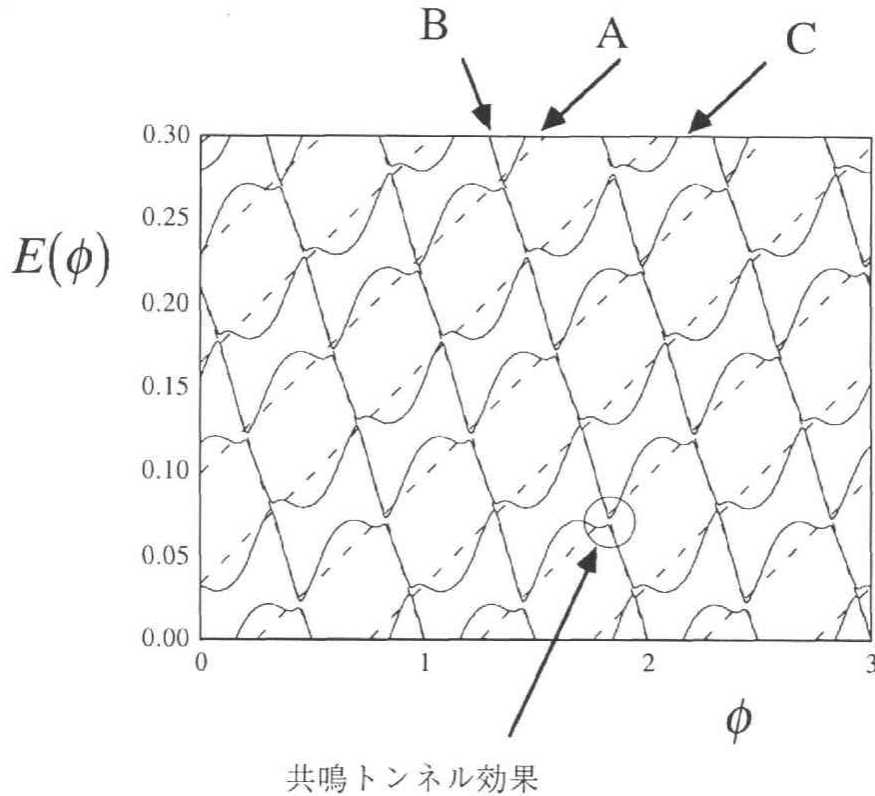


Fig. 3. 17 2DWSLにおけるミニバンド構造

$V=0.4$  ,  $F=0.05$  における 2DWSL. このパラメタでは三つの有効なミニバンドによる非一様シュタルクラダーの重ね合せとなっている. Fig. 3. 16の各バンドに由来する mini 2DWSL を対応する記号で示した. 破線は各々の勾配を示す. 異なる重率を持つミニバンドに生じた mini 2DWSL は異なる勾配を持ち互いに交差する. そこで共鳴が起こって縮退は解ける (例えば図中丸の部分) .

以上のような解析的な議論及び数値計算による裏付けによって, 先の物理的描像が正統化される.

#### (d) $V=1$ のときのエネルギースペクトルの自己相似性

電場がない場合には,  $V=1$  でハーパーモデルのエネルギースペクトルは自己相似性を示した. ここに電場をかけると, 新たに局在長  $L (= B/F)$  が導入されることによって自己相似性は破壊されてしまう. ところが, 前項で述べた

ように 2DWSL は準周期系の特徴でもある階層構造を保持している．このことは電場がないときの自己相似性を反映した性質が何らかの形で残されていることを暗示するものである．

電場がない場合には，全体のバンドと全体を三つのバンドと見たときの真ん中の重率  $\omega^3$  のミニバンドが相似であった．そこで，ある電場  $F'$  の下で重率  $\omega^3$  のミニバンドに生ずる mini 2DWSL は，電場  $F'$  を適当にスケールすることにより電場  $F$  の下での 2DWSL と相似になることが期待される．但し，mini 2DWSL は (3.31) 式にみられるようにバイアス項を含むのでこれを差し引いておかなければならない．以下では，バイアス項を差し引いた mini 2DWSL を修正 mini 2DWSL と呼ぶことにする．

2DWSL，及び mini 2DWSL を特徴付ける長さのスケールは，（実効）格子定数  $a$  ( $= 1/\xi$ ) と局在長  $L$  ( $= B/F$ ) の二つがある．これらの比  $a/L$  を 2DWSL を特徴付ける量として定義する．

Fig. 3.18 に考える二つのバンドとその条件を模式的に示した．電場  $F$  の場合の 2DWSL を特徴付ける二つの長さのスケールは，格子定数  $a = 1$  と局在長  $L = B/F$  である．一方，電場  $F'$  の場合の重率  $\omega^3$  のミニバンドに由来する mini 2DWSL については，実効格子定数  $a' = 1/\omega^3$  と局在長  $L' = B'/F'$  である．両者が相似であるための条件は，

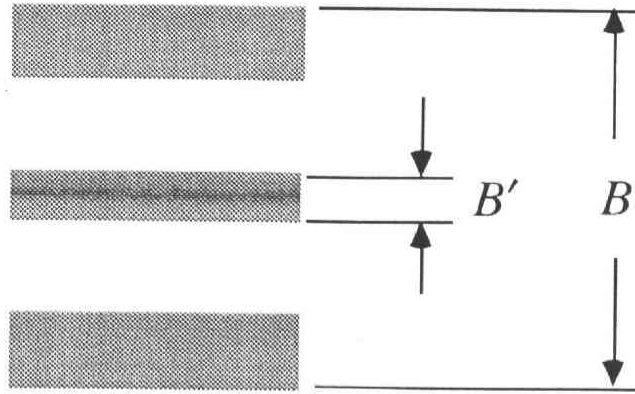
$$a/L = a'/L' \quad (3.35)$$

である．これより，二つの系の電場の間には

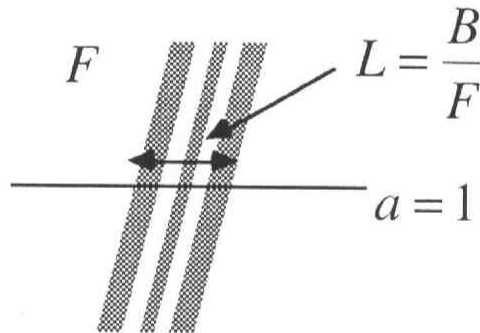
$$F' = (B'/B)(a/a')F \quad (3.36)$$

の関係があることが分かる．今の場合  $a/a' = \omega^3$  であり，また前章で述べたように  $B'/B = 0.0728$  である．

(a)  $F = 0$



(b)



(c)

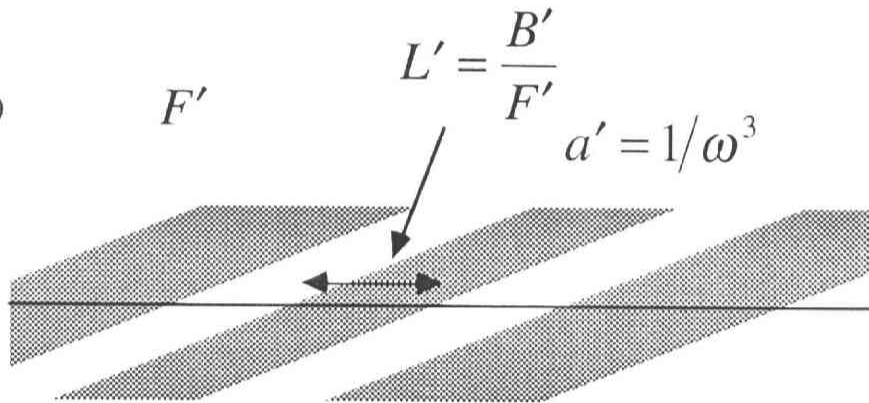
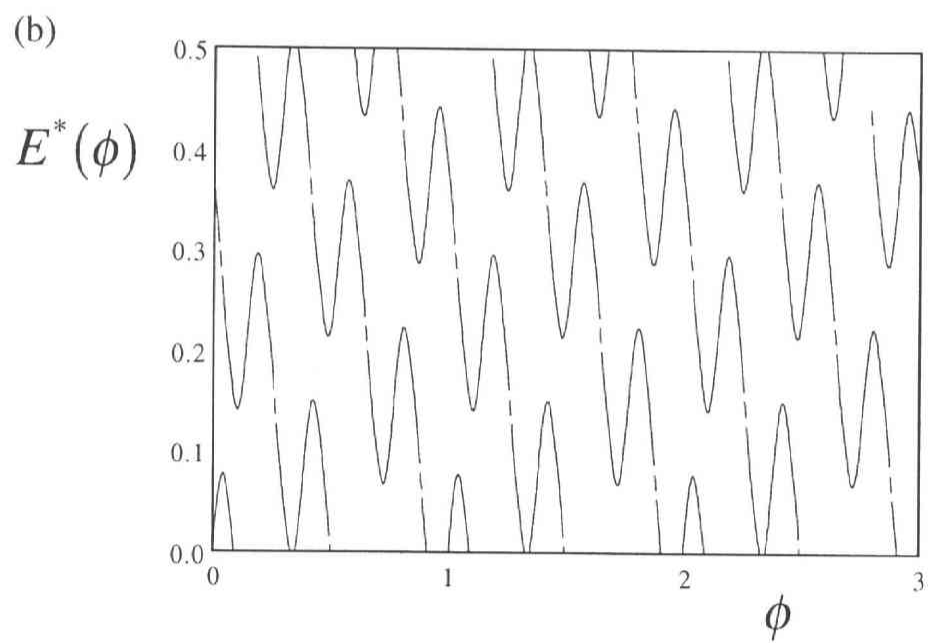
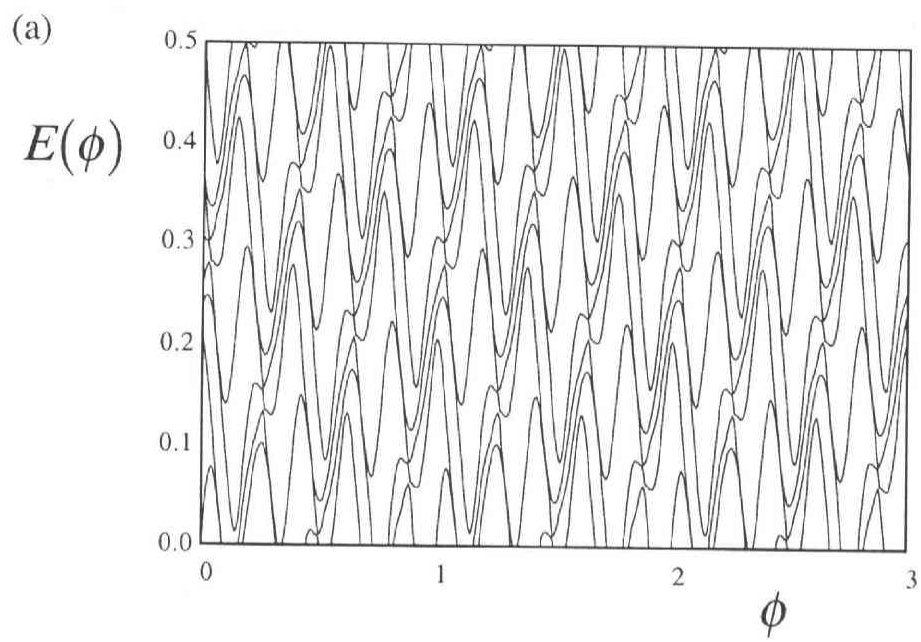


Fig. 3. 18 2DWSLが相似になる条件

電場が (a) 0, (b)  $F$ , (c)  $F'$  の場合のバンドの模式図を示した。電場  $F$  の場合の 2DWSL を特徴付ける二つの長さのスケールは、格子定数  $a = 1$  と局在長  $L = B/F$  である。一方、電場  $F'$  の場合の重率  $\omega^3$  のミニバンドに由来する mini 2DWSL については、実効格子定数  $a' = 1/\omega^3$  と局在長  $L' = B'/F'$  である。両者が相似であるための条件は  $a/L = a'/L'$  となる。



Fig. 3. 19 に相似なシュタルクラダーの一つの例を示す.



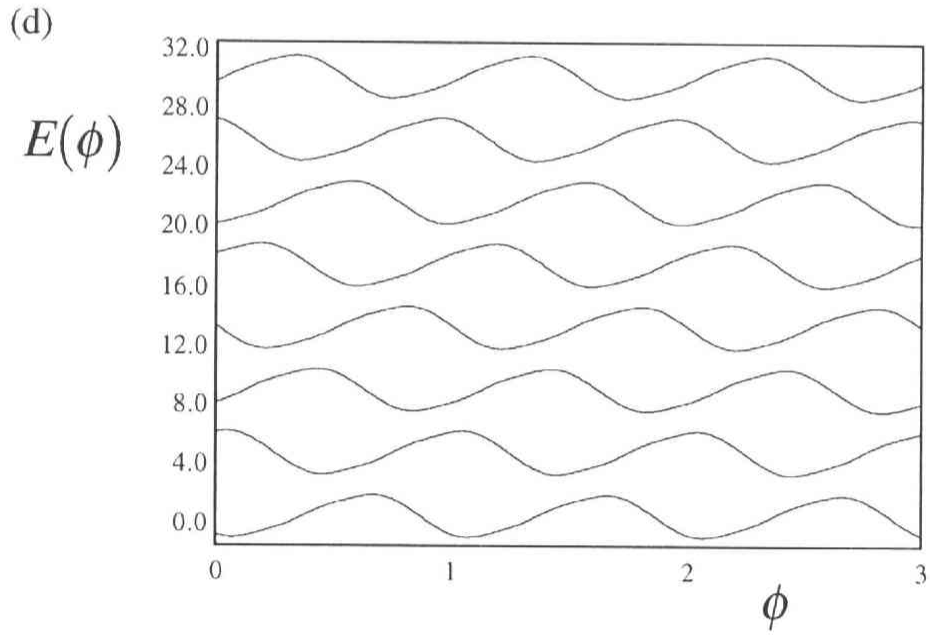
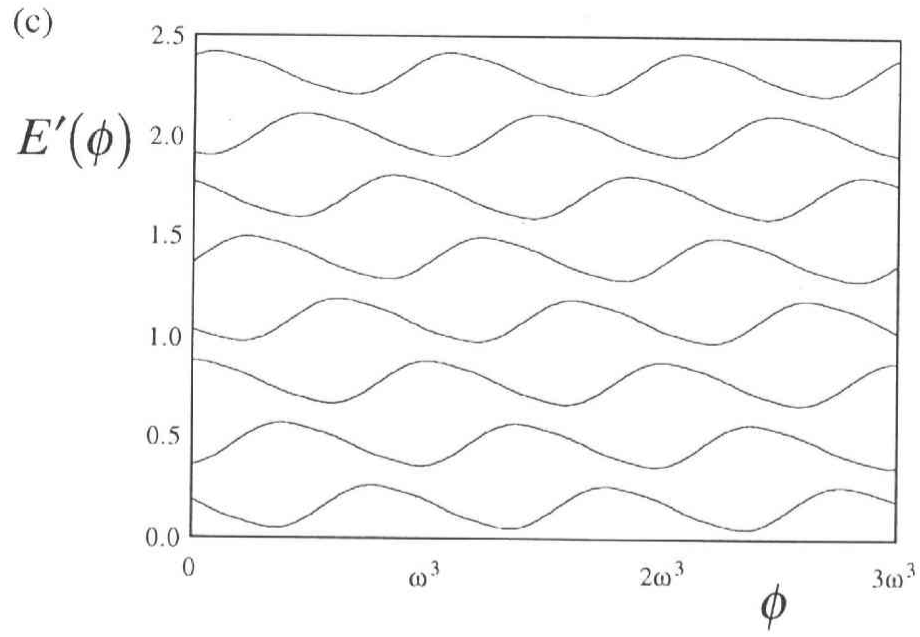


Fig. 3. 19 相似な 2DWSL

(a)  $F' = 0.0728$  のときの 2DWSL . (b) (a) から中央のミニバンドに由来する mini 2DWSL . (c) (b) から線形項を除き縦軸を  $F/(F'/\xi)$  ( $= 13.74$ ) 倍し, 横軸を  $1/\xi$  ( $= 1/\omega^3 = 4.236\dots$ ) 倍にスケールした修正 mini 2DWSL. (d)  $F = 1/\omega^3$  のときの 2DWSL. (a) と (d) が相似になっている.

電場  $F=1/\omega^3$  の場合を考えると、(3.36)式によってスケールした電場は  $F'=0.0728$  である。(a) は  $F'=0.0728$  のときの 2DWSL である。このうち中央のミニバンドに由来する mini 2DWSL だけを抜き出すと (b) のようになる。この図からさらに前項の (3.31)式にしたがって線形項を除き (3.32)式及び (3.33)式にしたがって縦軸を  $F/(F'/\xi)$  ( $=13.74$ ) 倍し、横軸を  $1/\xi$  ( $=1/\omega^3=4.236\dots$ ) 倍すると (c) のようになる。(d) は  $F=1/\omega^3$  の下での 2DWSL であるが、これと (a) とが鏡映関係になっていることが分かる。したがって、全体の 2DWSL と電場をスケールした修正 mini 2DWSL とは確かに相似な関係になっていることが確認できた。

また、これらが鏡映関係となることは、前項の (3.34)式に現われる非整合比を求めることにより示される。すなわち今の場合、中央のミニバンドの重率は  $\xi=\omega^3=-1+2\omega$  であり、その指数は  $n=-1$ 、 $m=-2$  である。ここで、前項の議論に従って二つの整数  $p$ 、 $q$  および無理数  $\eta$  を求めると  $p=-2$ 、 $q=-3$ 、 $\eta=-2+3\omega=-\omega^4$  となる。故に、非整合比は  $\eta/\xi=(p-q\omega)/(n-m\omega)=-\omega$  となる。この比が  $\omega$  でなく  $-\omega$  となっていることにより (a) と (d) が鏡映の関係になることが分かる。

ここで導入した  $a/L$  という無次元量が、 $V=1$  のときの 2DWSL を特徴づける量として適当であることが数値的に証明された。

#### (e) 波動関数の重心と摂動論 ( $V>1$ )

変調ポテンシャルの値  $V$  が 1 より大きい領域では  $F \neq 0$  でも電場がないときと同様に全ての波動関数が局在する。このような場合には前章で考察したように波動関数の重心の大きさの順によるエネルギー準位の番号付けが有効である。このときハミルトニアンを満たす関係式、(3.4)式及び(3.5)式から全ての番号  $i$  に対して

$$\Psi_i(\phi+1) = \Psi_{i+m}(\phi) \quad (3.37)$$

$$\Psi_i(\phi) = U \Psi_{i-n}(\phi+\omega) \quad (3.38)$$

を満たす整数  $m, n$  が存在することが言える．これらの式は電場がない場合の関係式，(2.15)式及び(2.16)式と同様の式である．ここで， $V \rightarrow \infty$  の極限で  $\Psi_i(\phi) \rightarrow |i\rangle$  であることとの整合性から  $m=0, n=1$  が求められる．その結果，エネルギー準位，波動関数，波動関数の重心はエネルギー準位の大きさの順に番号付けした場合の関係式，(3.10)式～(3.18)式と全く同じ関係式

$$E_i(\phi+1) = E_i(\phi) \quad (3.39)$$

$$E_i(\phi) = E_{i-1}(\phi + \omega) + F \quad (3.40)$$

$$\Psi_i(\phi+1) = \Psi_i(\phi) \quad (3.41)$$

$$\Psi_i(\phi) = U \Psi_{i-1}(\phi + \omega) \quad (3.42)$$

$$X_i(\phi+1) = X_i(\phi) \quad (3.43)$$

$$X_i(\phi) = X_{i-1}(\phi + \omega) + 1 \quad (3.44)$$

及び，

$$E_i(\phi) = E_0(\phi + i\omega) + iF \quad (3.45)$$

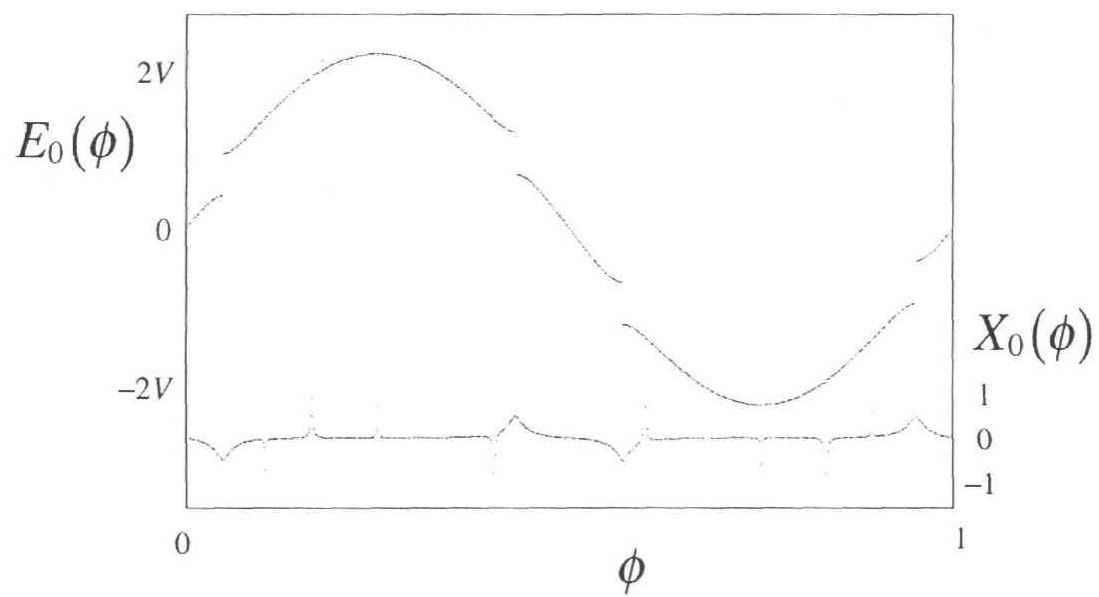
$$\Psi_i(\phi) = U^i \Psi_0(\phi + i\omega) \quad (3.46)$$

$$X_i(\phi) = X_0(\phi + i\omega) + i \quad (3.47)$$

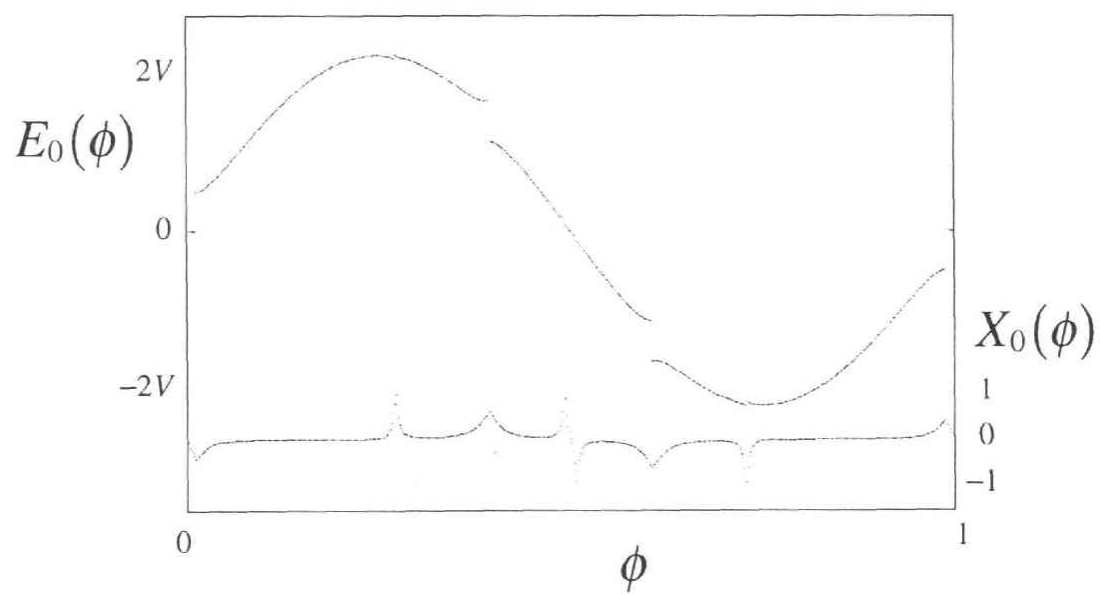
を満たすことが示される．したがって，この場合にもすべての番号  $i$ （ここでは重心の大きさの順に付けられた番号）における  $\Psi_i(\phi)$ ， $X_i(\phi)$ ， $E_i(\phi)$  が  $\Psi_0(\phi)$ ， $X_0(\phi)$ ， $E_0(\phi)$  から求められる．

さらに同様な考察（(3.19)式～(3.21)式）を経れば，位相依存性を示す関数  $\Psi_0(\phi)$ ， $X_0(\phi)$ ， $E_0(\phi)$  は  $\phi=0$  の時の十分大きな値の集合から再現可能なことが分かる．Fig. 3.20 にいくつかのパラメタの場合の 0 番目，すなわち原点に最も近いところに波動関数の重心のある状態のエネルギー準位と波動関数の重心の位相依存性，すなわち  $E_0(\phi)$  及び  $X_0(\phi)$  を示した．

(a)



(b)



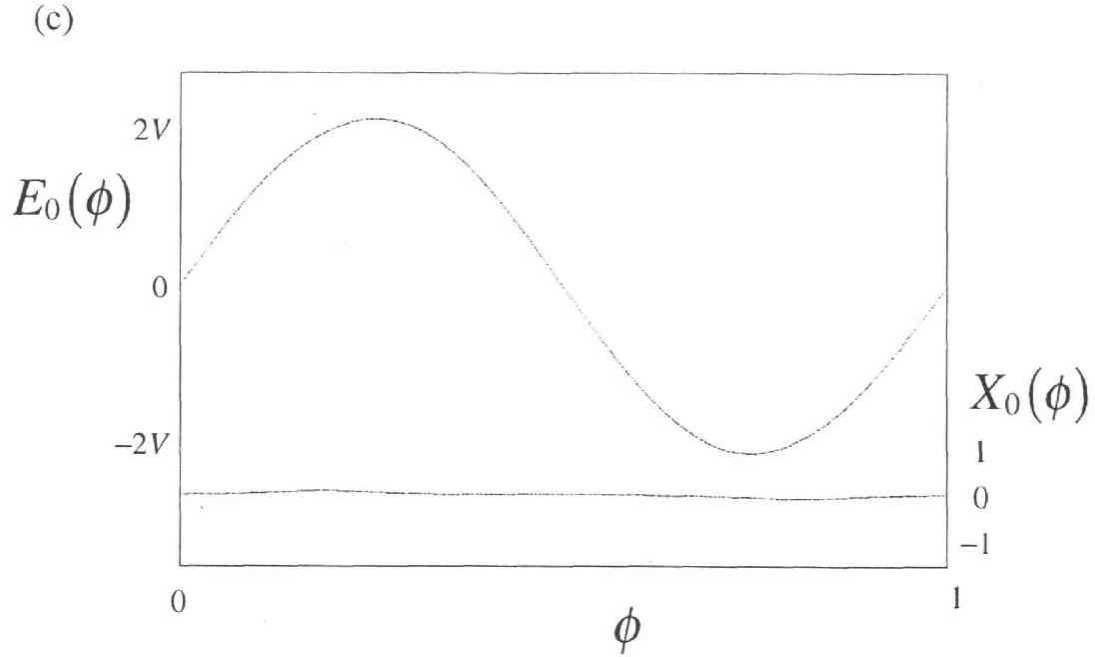


Fig. 3.20  $V > 1$  のときの 0 番目のエネルギー準位と波動関数の重心の位相依存性

電場の強さは (a)  $F = 1.0$ , (b)  $F = 1/\omega^3 = 4.236\dots$ , (c)  $F = 1/\omega^6 = 17.9\dots$ . 変調ポテンシャルの振幅は全て  $V = 4.0$ . 電場の強さによってギャップの数と位置が変化している.

エネルギー準位  $E_0(\phi)$  の全体はサインカーブとなっていて、ギャップがあるところでは重心  $X_0(\phi)$  が変化している. これらの性質は、電場がない場合の位相依存性 (Fig. 2.11) と非常によく似ている. 電場がない場合と異なるのは、ギャップの現われ方が電場によって変化することである.  $F = 1.0$  の場合には大きなギャップがあるが、電場の強さを変化させるとギャップの位置が変化し、 $F = 17.9\dots$  の場合にはギャップがなくなっている.

このような性質は、電場がない場合と同様に摂動論によって理解できる. 電場のかかった場合のハミルトニアン ((3.1)式) で、運動エネルギーの項  $K_{op}$  を摂動として扱う. 非摂動系のシュレーディンガー方程式は

$$(V_{op}(\phi) + F_{op})|i\rangle = E_i^{(0)}(\phi)|i\rangle \quad (3.48)$$

となり，したがって非摂動エネルギー  $E_i^{(0)}(\phi)$  は

$$\begin{aligned} E_i^{(0)}(\phi) &= \langle i | (V_{op}(\phi) + F_{op}) | i \rangle \\ &= 2V \sin(2\pi(i\omega + \phi)) + iF \end{aligned} \quad (3.49)$$

と求められる．Fig. 3.21 に  $i = 0$  の場合，すなわち原点に局在する状態の非摂動エネルギー及び， $i = \pm 1$  の場合，すなわち原点の両隣の格子点に局在する状態の非摂動エネルギーを重ねてみた．電場がないときと異なるのは相対的な位置が位相方向に  $\mp\omega$  だけずれるのに加えて，エネルギー軸方向に  $\pm F$  だけずれることである．このため，二つの非摂動エネルギーが交差し縮退する位相が電場によって変化するのである．(a) は隣り合う格子点に局在する状態の準位が交差し，縮退が起こる場合である．

交差した点では摂動によって縮退が解け乗り換えが起こってギャップが生じる．その大きさは跳び移り積分の 2 倍の 2 になっている．また，エネルギー準位  $E_0(\phi)$  が不連続となるところで波動関数の重心  $X_0(\phi)$  がずれているのは，別の格子点に局在する波動関数と相互作用を起こしていることを示すものである．一番大きなギャップのところでは波動関数の重心は  $\pm 1/2$  となっていて隣の格子点に局在する波動関数と一対一に混じっていることが分かる．

電場  $F$  を大きくしていくと，ある値以上では (b) に示すように両隣の格子点に局在する非摂動エネルギーが交差しなくなる．このときにはエネルギー準位は各格子点で変調ポテンシャルの位相依存性と同じ振動をするようになる．

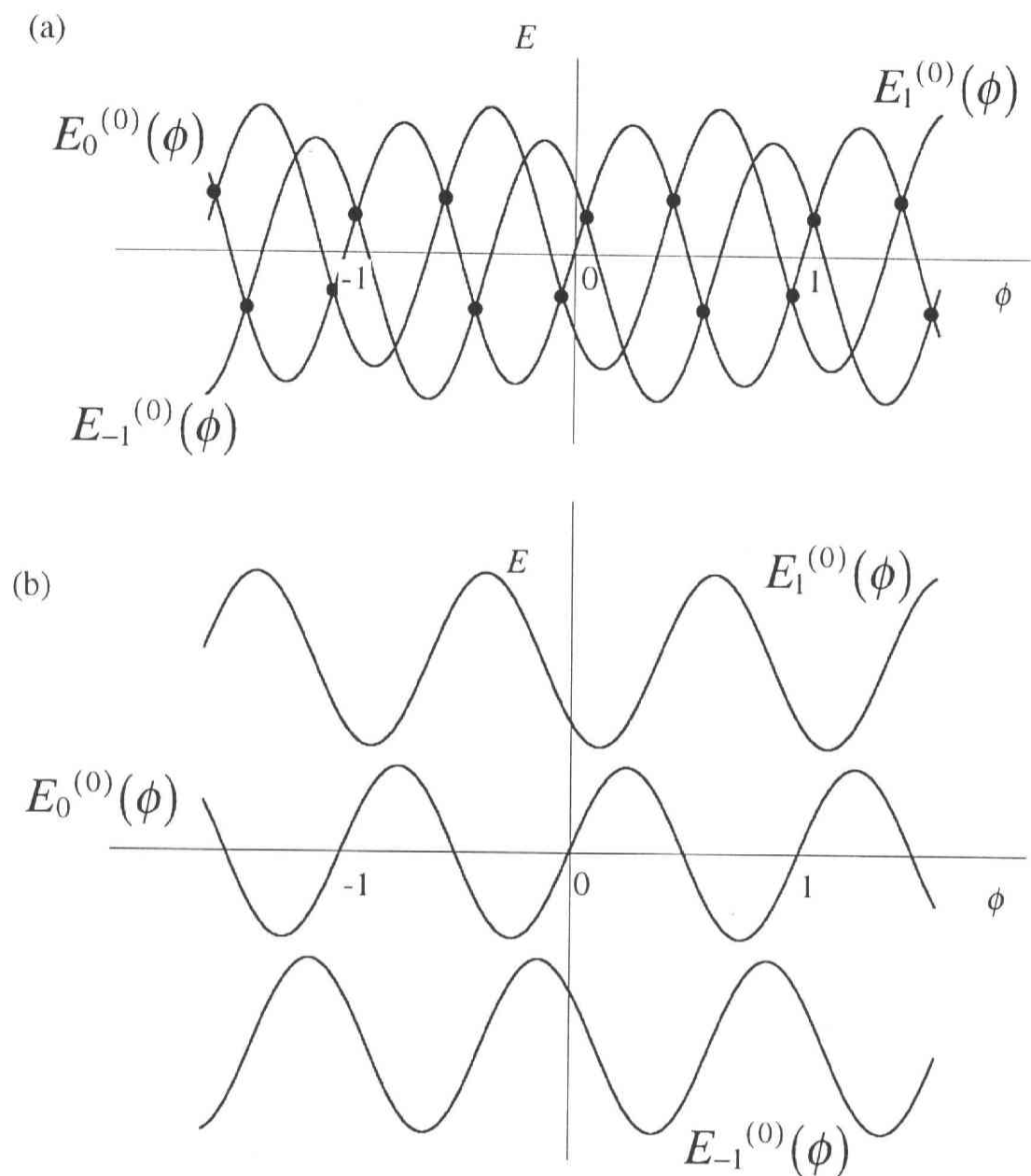


Fig. 3.21 非摂動エネルギーの縮退とギャップの位置

原点に局在する状態の非摂動エネルギー  $E_0^{(0)}(\phi)$  及び、原点の両隣の格子点に局在する状態の非摂動エネルギー  $E_{\pm 1}^{(0)}(\phi)$  を重ねた。

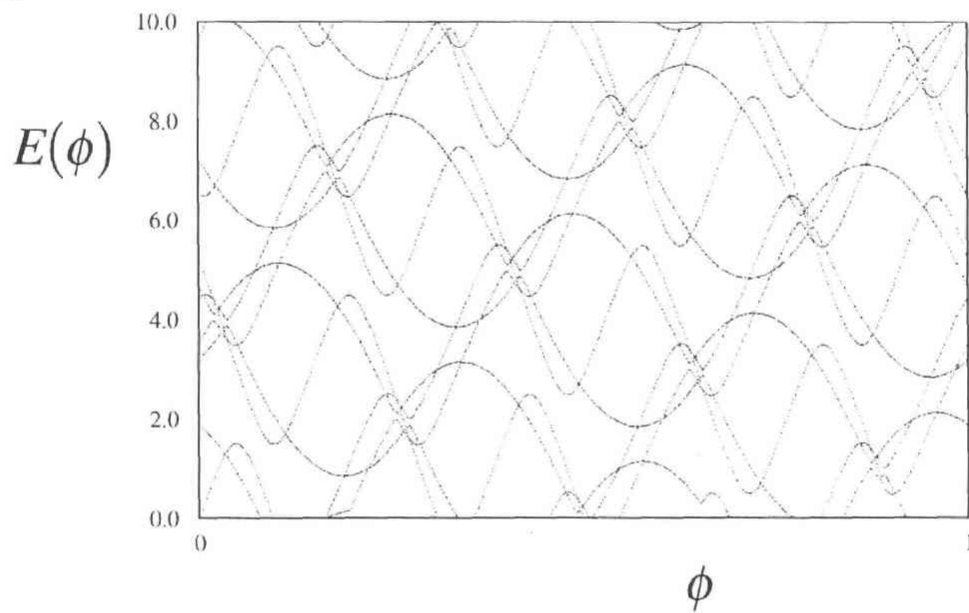
(a) 電場が弱い場合には黒丸で示した場所で非摂動エネルギーが交差してギャップができる。

(b) 電場が強くなると隣り合う格子点に局在する状態の非摂動エネルギーが交差しなくなり、ギャップはなくなる。

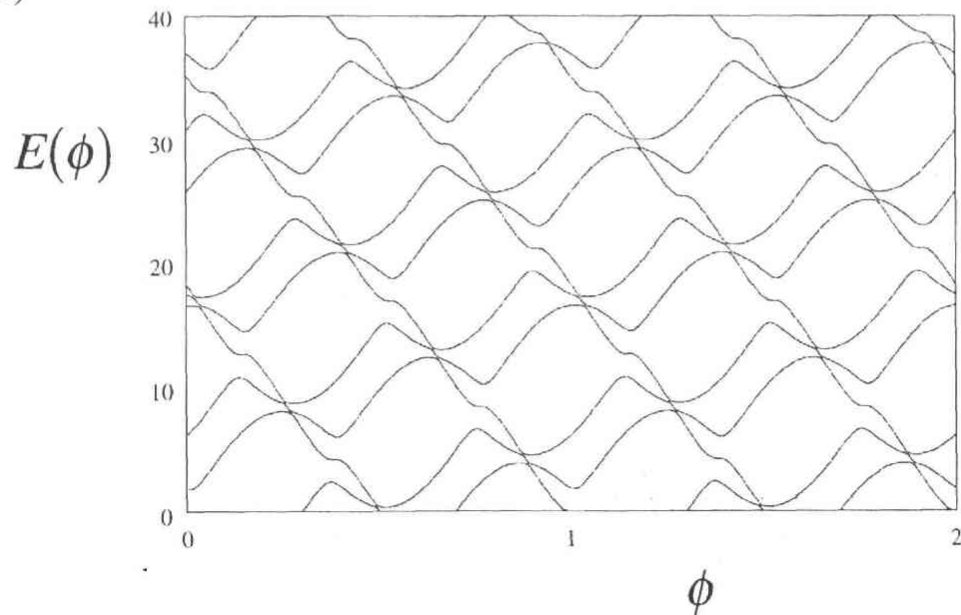


このような見方をすると局在領域における複雑な 2DWSL の構造が理解できる。この領域での 2DWSL は各格子点に局在する状態のエネルギーの位相依存性（正弦波）の重ね合せで近似できる。もしもこれらのエネルギーが交差し縮退した場合には、それらの状態が局在する格子点間距離に応じた相互作用によって縮退が解け分裂する。Fig. 3.20 の各々のパラメタに対応する 2DWSL を Fig. 3.22 に示した。

(a)



(b)



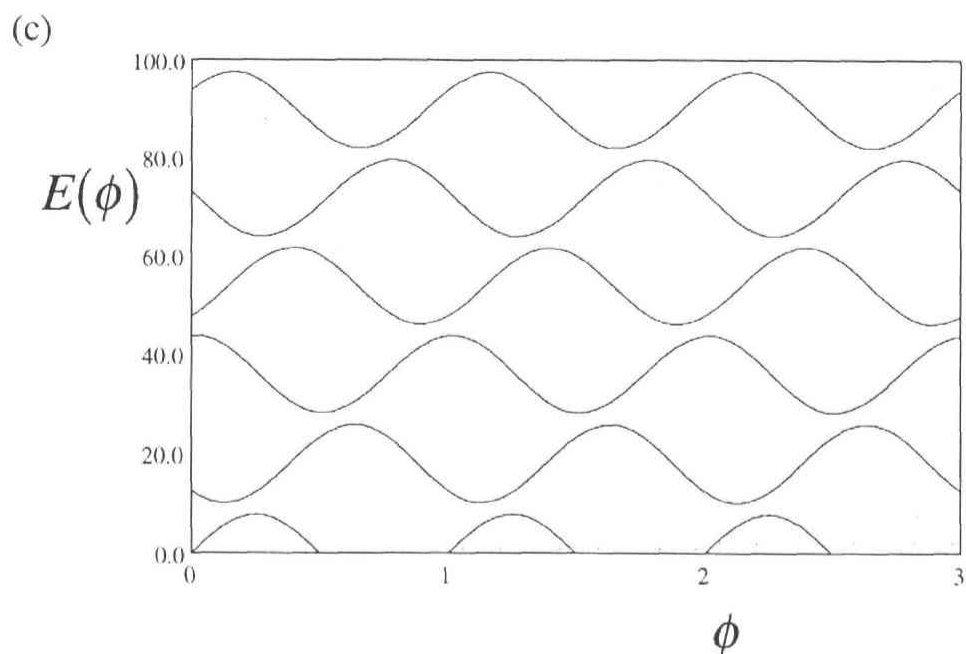


Fig. 3.22  $V > 1$  のときの 2DWSL

電場の強さは (a)  $F = 1.0$ , (b)  $F = 1/\omega^3 = 4.236\dots$ , (c)  $F = 1/\omega^6 = 17.9\dots$ . 変調ポテンシャルの振幅は全て  $V = 4.0$ .

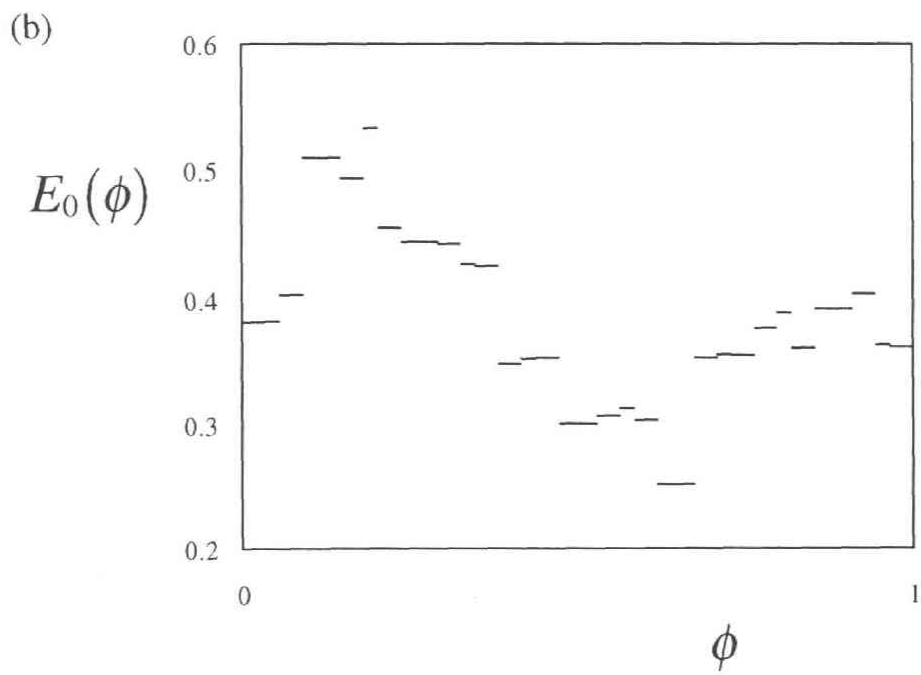
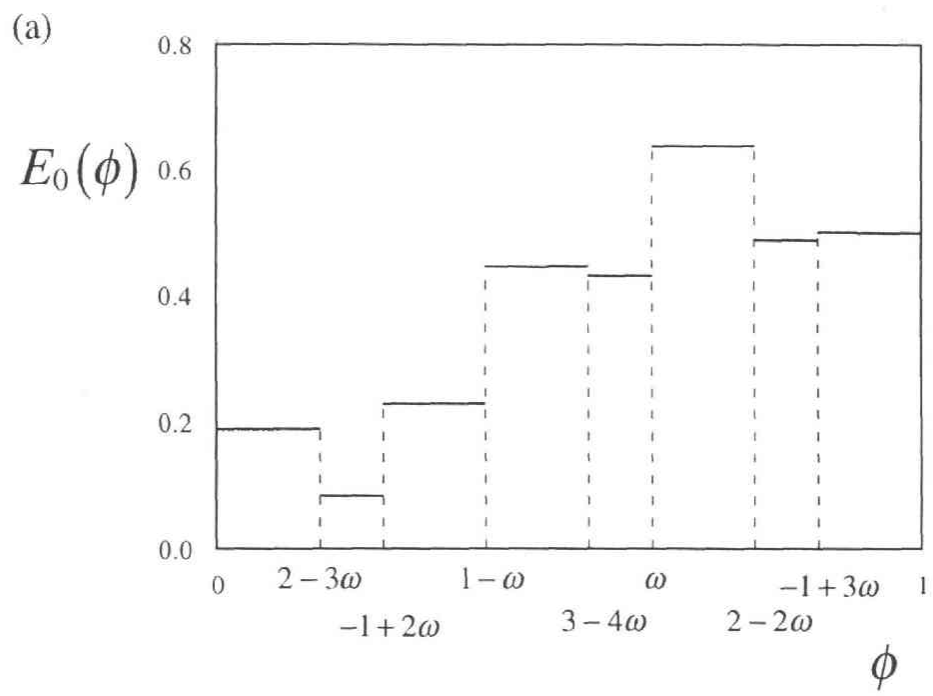
このように波動関数の重心の順番によるエネルギー準位の番号付けは、変調ポテンシャルの振幅  $V$  が 1 より大きい場合の理解には有効である。この方法を利用した結果、各準位の位相依存性は簡単な摂動の考え方によって理解でき、複雑な 2DWSL の構造も解明された。

### (3) フィボナッチ格子

フィボナッチ格子の場合にはハーパーモデルとは非常に異なった振る舞いをする事が分かった。

#### (a) エネルギー準位の位相依存性<sup>30)</sup>

エネルギー準位を大きさの順に番号付けした場合の 0 番目の準位の位相依存性を Fig. 3.23 に示した。変調ポテンシャルの振幅  $V = 1.0$  を固定して、いくつかの  $F$  に対して示している。



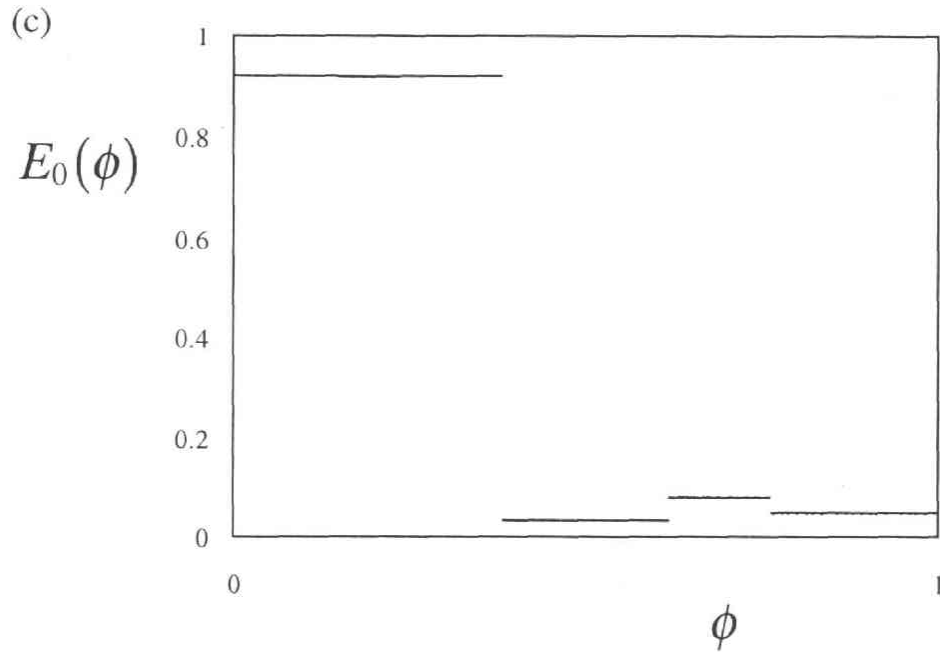


Fig. 3.23 フィボナッチ格子のエネルギー準位の位相依存性

(a)  $F = 1.0$ , (b)  $F = 0.2$ , (c)  $F = 5.0$ . また, 全て  $V = 1.0$  である. 位相依存性は区分的定数関数となる. また, (a) に示したように不連続点の位相は二つの整数  $n$ ,  $m$  を用いて  $n - m\omega$  と表わされる.

フィボナッチ格子の場合の 0 番目のエネルギー準位の位相依存性  $E_0(\phi)$  は有限個の不連続点を持つ区分的定数関数である. この不連続点の個数は電場の大きさ  $F$  が小さくなるほど増加する傾向にある. また, 不連続となる  $\phi$  の値は二つの整数  $n$ ,  $m$  を用いて,  $n - m\omega$  と表わすことができる.

$E_0(\phi)$  の不連続性と不連続点の位相は, フィボナッチ格子の変調ポテンシャルの構造によって説明することができる. 前章で示したようにフィボナッチ格子の変調ポテンシャルは, 位相  $\phi$  を変化させたとき変調ポテンシャルのフリップが起こり環境が不連続的に変化する. このような環境の不連続的な変化が  $E_0(\phi)$  の不連続性に影響している. 変調ポテンシャルのフリップは, 二つの整数  $n$ ,  $m$  を用いてちょうど  $\phi = n - m\omega$  となるところで生じる. 電場によって波動関数は局在長  $L$  ( $= B/F$ ) の範囲に局在するが,  $\phi$  を変化させたときに変調ポテンシャルのフリップがこの領域内で生じた場合エネルギーは変化する. こ

のような理解で不連続性と不連続点の位相はおおよそ理解できる．しかし，不連続点の位相とギャップの大きさとの関係はまだ明らかにされていない．

さて，フィボナッチ格子の場合の解析には以下のような考え方に基づいた方法がより有効であることが分かった．そこで，位相依存性の議論はここまでとし，以下ではその方法に基づいた議論を行うことにする．

#### (b) 還元エネルギースペクトル (RES)

いま，フィボナッチ格子上のある局所構造上に波動関数が厳密に局在したとする．前章の Conway の定理の精密化で述べたように，フィボナッチ格子上では同種の局所構造がフィボナッチ配列で並んでいる．したがって，そのような同種の局所構造上にも同じ形の波動関数が局在する．このような波動関数どうしのエネルギー差は電場バイアスポテンシャルの差に等しく，それは電場  $F$  の整数倍となる．

このような性質を期待すると，波動関数をその局在する局所構造によって分類するには各エネルギー準位を電場の整数倍の項とそこからのずれに分け，このずれの大きさによって分類する方法が有効であると考えられる．このようなずれ  $D_i$  は

$$D_i = E_i \bmod F \quad (3.50)$$

と表わすことができる．この  $D_i$  を還元エネルギー準位と呼び，全ての還元エネルギー準位の集合  $\{D_i \mid i \in \mathbb{Z}\}$  を還元エネルギースペクトル (Reduced Energy Spectrum, 以下 RES) と呼ぶことにする． $E_i$  から  $D_i$  への変換は区間  $(-\infty, \infty)$  から区間  $[0, F)$  への  $\bmod F$  による写像である．還元エネルギー準位  $D_i$  と前に定義したエネルギーの平均間隔からのシフト  $\Delta_i$  は異なるものである．

$F = 0.4$  のとき変調ポテンシャルの大きさ  $V$  を変化させてこの RES をプロットしたものが Fig. 3.24 である．ただし，縦軸は電場で規格化している．

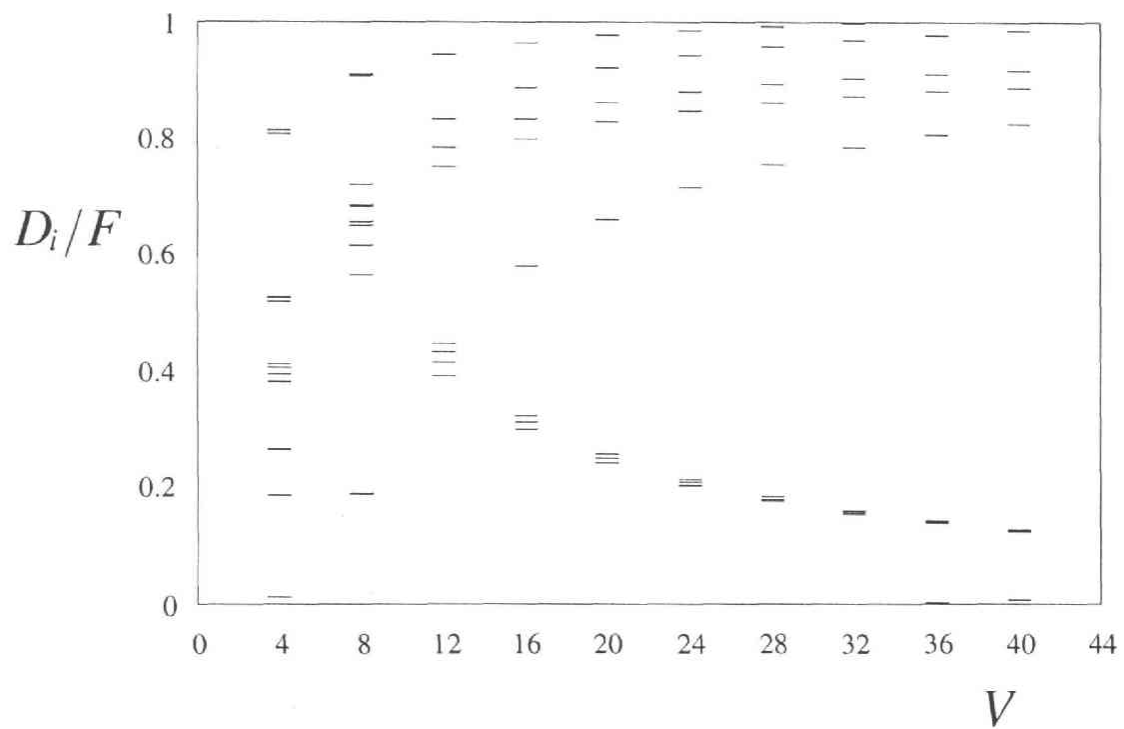
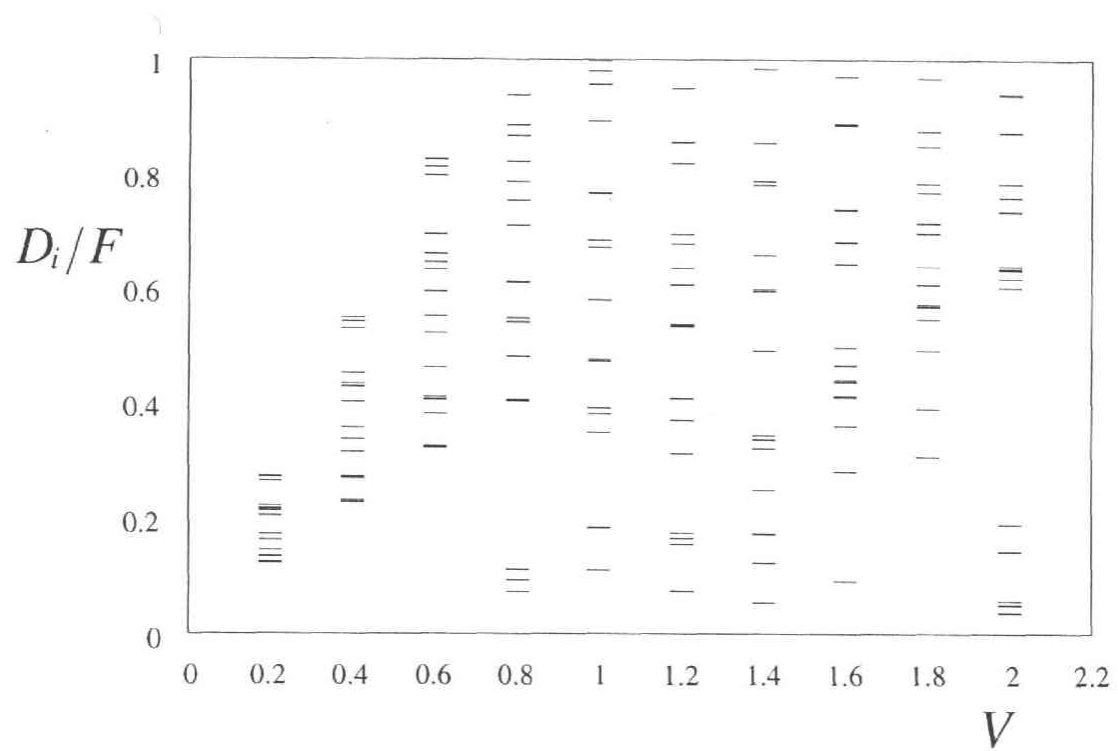


Fig. 3.24 還元エネルギースペクトル (RES)

RES を電場  $F=0.4$  に固定し,  $V$  を変化させてプロットした. このグラフの精度では 600 から 800 の準位が数個から十数個の準位に縮退しているように見える.

この図では 600 から 800 ある準位が数個から十数個の準位に縮退しているように見える。波動関数がもしも局在領域に完全に局在している（局在領域の外で振幅が 0）ならば RES は縮退している。しかし、実際には波動関数は局在領域の外にすそを引き振幅を持っている。したがって、RES は厳密には縮退していないと考えられる。

Fig. 3. 25 に  $F=0.4$  ,  $V=32$  の場合の RES を示した。ギャップによって隔てられたエネルギーの集合をクラスターと呼ぶことにすると、この場合の RES は最も大きなギャップに隔てられた二つのクラスターに分裂している。一方のクラスターは a , b , c , d , e という五つのクラスターを内部構造として持つ。同様にもう一方のクラスターも拡大して見ると内部に三つのクラスターが含まれている。これらのクラスターもそれぞれさらに内部構造を持つがこの図のスケールでは見えない。このように RES は階層的なクラスター構造を持っていることが分かる。

また、全状態数を 1 となるように規格化したときの各クラスターの状態数をそのクラスターの重率と呼ぶことにすると、全てのクラスターは  $\omega$  のべき乗の重率を持つことが分かった。図の各クラスターの右に示したのがそのクラスターの重率である。例えば a というクラスターは全状態の  $\omega^4 \approx 14.5\%$  の状態からなる。

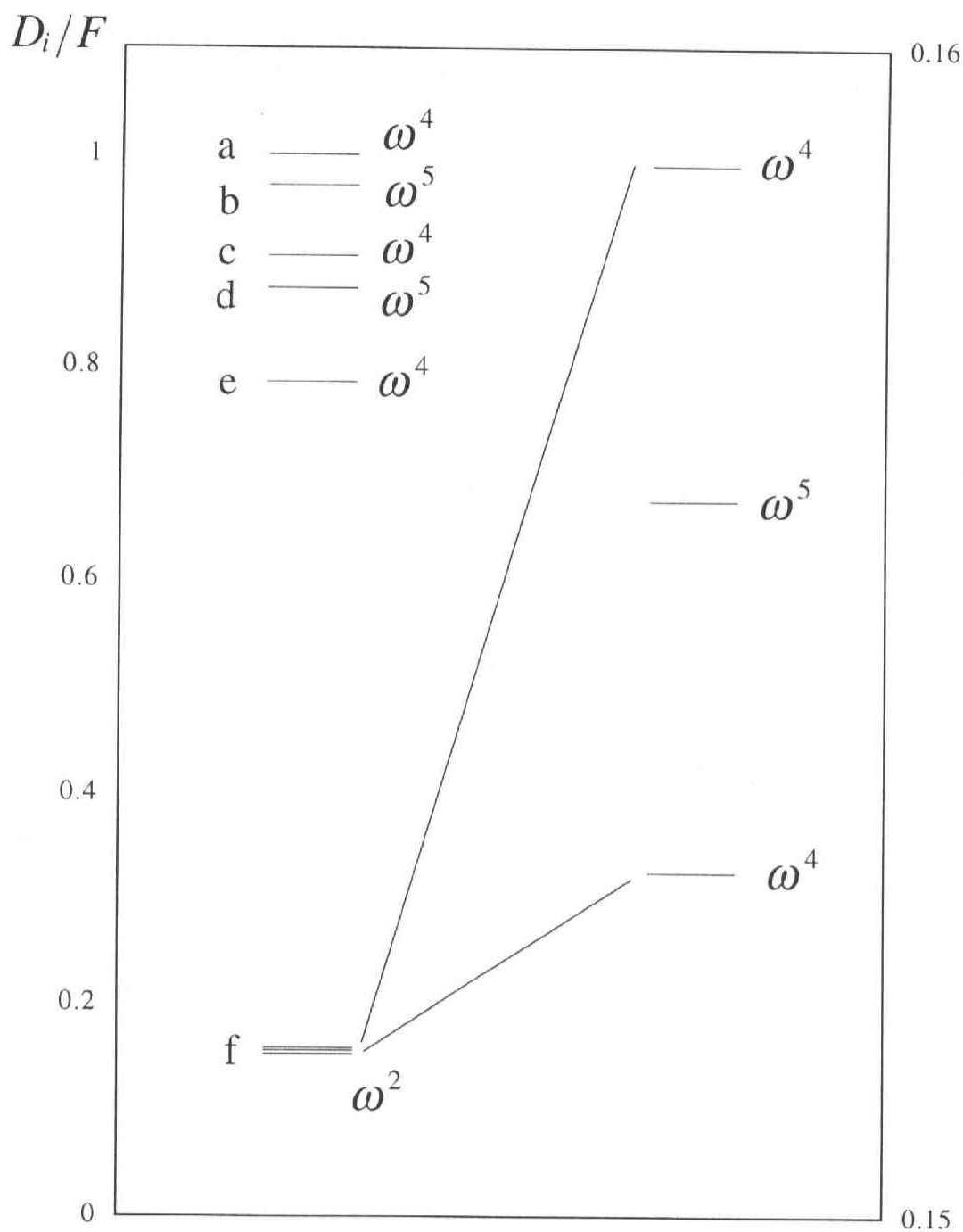


Fig. 3. 25 還元エネルギースペクトル (RES) のクラスター構造

RES は階層的なクラスター構造を持っている。クラスター f を拡大すると右のような三つのクラスターに分裂していることが分かる。このスケールでは縮退して見える a から e までのクラスターも同様に内部構造を持つ。また全てのクラスターは  $\omega$  のべき乗の重率を持つ。



このような階層的クラスター構造を持ち、各クラスターの重率が  $\omega$  のべき乗であるような構造は電場がないときの準周期系のスペクトルに類似している。このような1次元点集合は fractal の可能性があるため、次に RES の容量次元を計算によって求めた。

$F = 0.4$ ,  $V = 32$  の場合と  $F = 0.4$ ,  $V = 0.2$  の場合の RES について、前章の容量次元の定義に従って  $b$  と  $M$  を計算しプロットしたのが Fig. 3.26 である。 $b$  が小さくなるにつれてグラフは水平に近づいている。したがって、RES の容量次元は0であり、skinny fractal であるということが分かる。図には比較のため pure fractal ( $0 < D < 1$ ) の例であるハーパーモデルの臨界点でのエネルギースペクトルと fat fractal ( $D = 1$ ) の例であるハーパーモデルの非局在領域でのエネルギースペクトルに対する結果も示している。

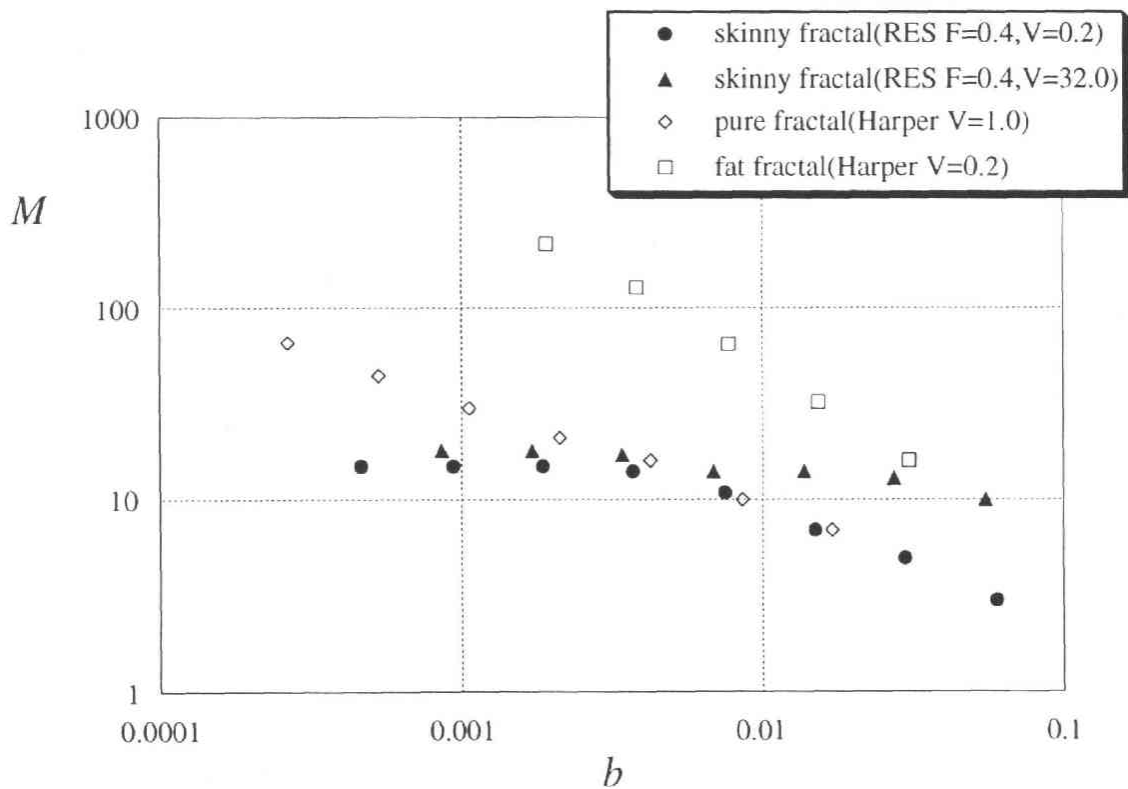


Fig. 3.26 還元エネルギースペクトル (RES) の容量次元

RES の容量次元は0である。したがって、RES は skinny fractal であることが分かる。物理で skinny fractal の性質を示すものを発見したのは本研究が初めてである。

RES は skinny fractal であるが、これは本研究によって初めて発見された物理現象であり本研究の大きな成果である。また、このことは RES が実質上有限個のクラスターからなるということを意味している。

ここで RES が skinny fractal となる物理的な意味を考えてみる。縮退したように見える二つの準位のエネルギー差は、波動関数のすその方での局所構造の違いの影響である。ところが、前章で述べたとおり一様電場下の波動関数の振幅は距離と共に急激に小さくなることが分かっている。したがって、二つの準位のエネルギー差を与える局所構造の違いが局在中心から遠のくほど、二つの準位のエネルギー差は小さくなっていく。このことは、RES のクラスターを拡大していくと実質上点スペクトルのようになってしまうことに対応している。すなわち RES が skinny fractal となるのである。RES が skinny fractal となることは、準周期系のスペクトルの性質（広義の fractal）と電場による波動関数の振る舞いによって理解できるのである。

#### (c) フィボナッチシュタルクラダー（FSL）

RES が事実上有限個のクラスターに分割できるので、それに対応して元のエネルギースペクトルをいくつかの副エネルギースペクトルに分けることができる。Fig. 3.27 に  $F = 0.4$  ,  $V = 32$  の場合について示した。このパラメタでは実質上 a, b, c, d, e, f の六つのクラスターからなるとし、第 1 次近似としてクラスター f の内部構造は無視した。

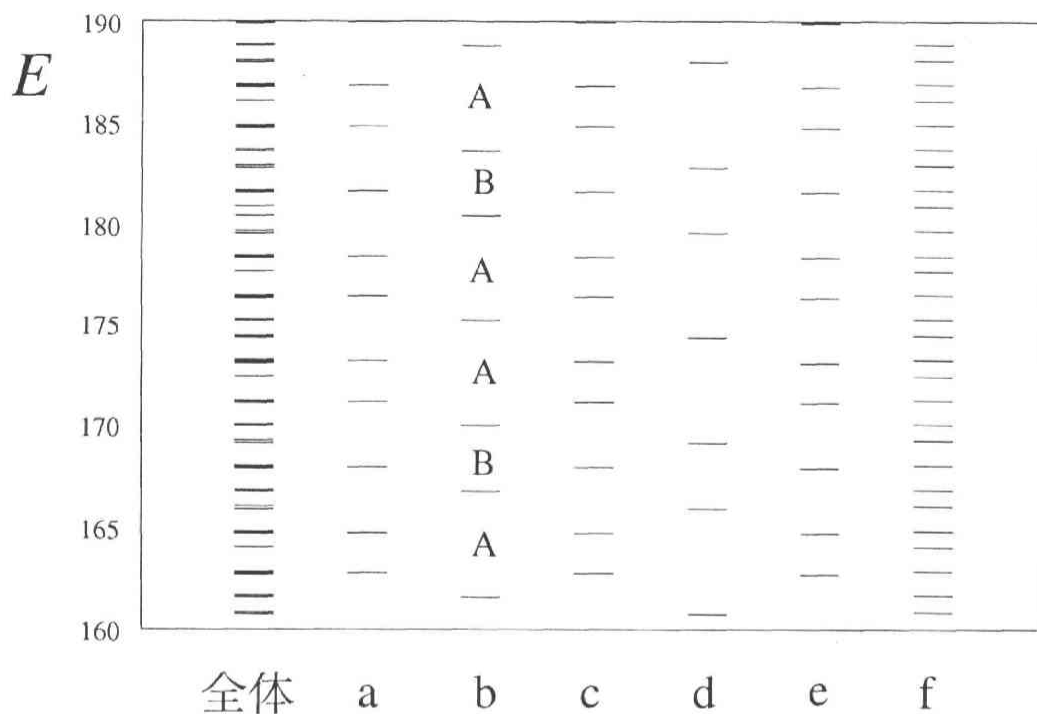


Fig. 3.27 フィボナッチシュタルクラダー (FSL)

各クラスターに属する準位だけを抜き出すと FSL となっている. FSL は精密化された Conway の定理で示したフィボナッチ配列と相似である. クラスター b の場合の二つの間隔は  $A = 13F$ ,  $B = 8F$  である.

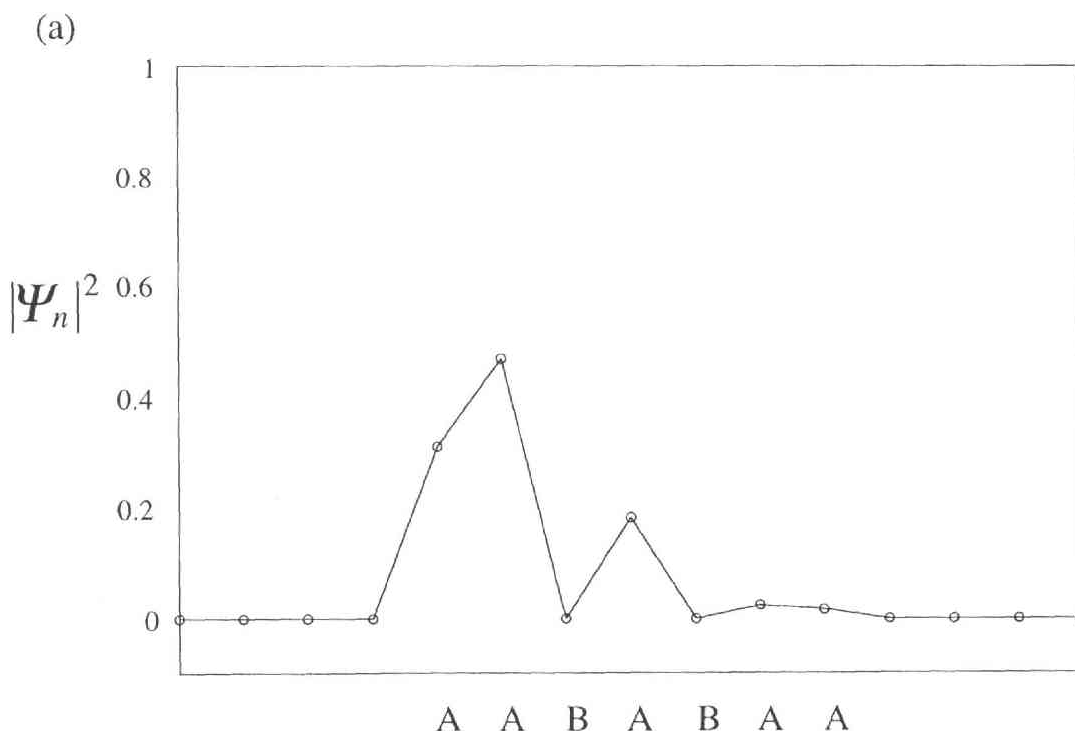
その結果, 全ての副スペクトルは次のような三つの性質を持つことが分かった.

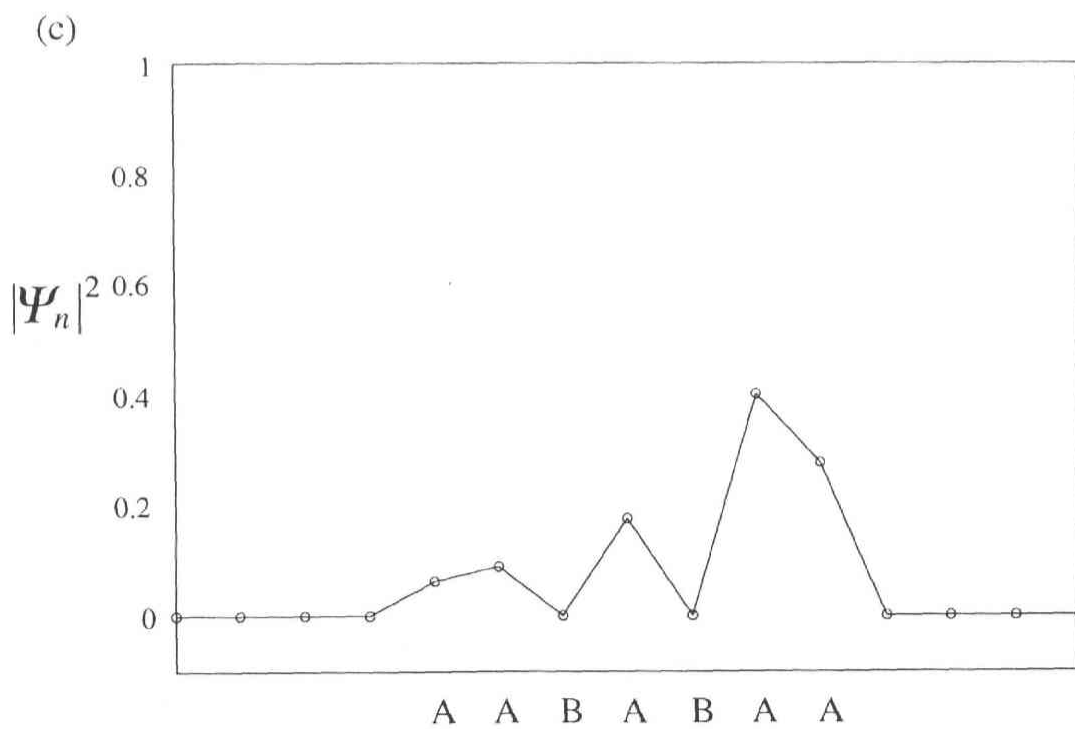
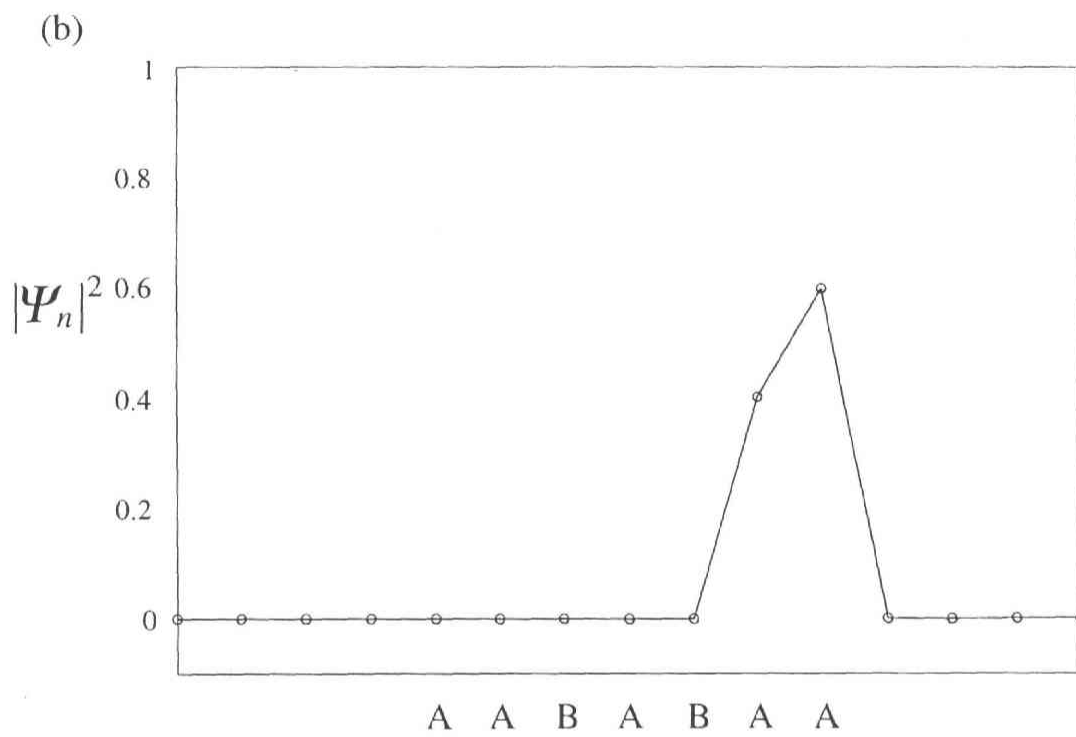
1. RES の一つのクラスターに含まれる準位の間のエネルギー差を無視する近似では準位間隔は 2 種類しかない.
2. 定義により 2 種類の間隔は電場  $F$  の整数倍となるが, この二つの整数が隣り合うフィボナッチ数となる.
3. これら 2 種類の間隔の並びがフィボナッチ列になっている.

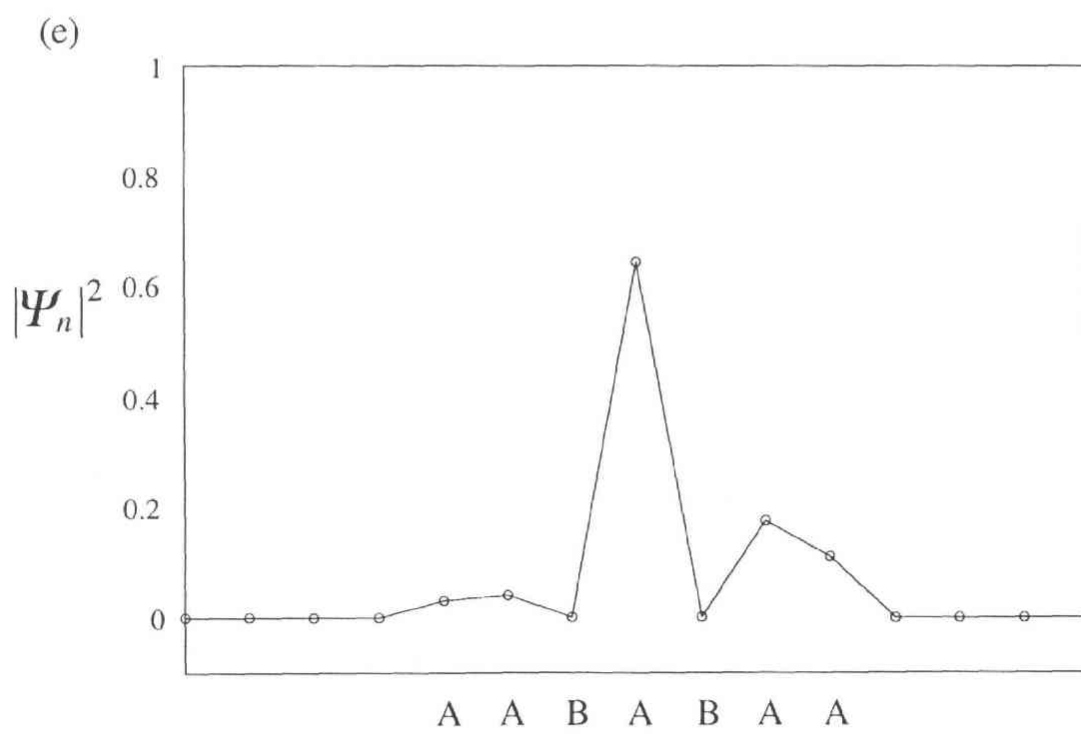
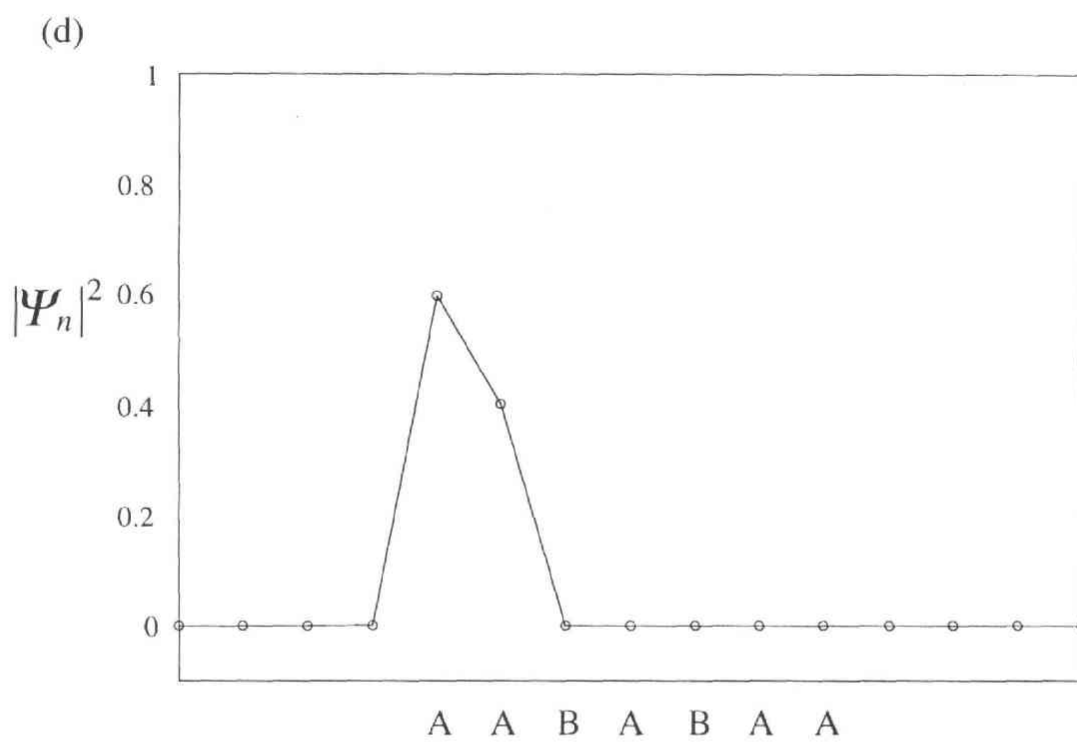
このような副スペクトルの構造は本研究で精密化された Conway の定理で述べたフィボナッチ配列と相似である。また、これらの性質からクラスターの重率が  $\omega^k$  である場合 2 種類の間隔を与えるフィボナッチ数は  $F_{k+1}$  と  $F_{k+2}$  となることが導かれる。

このような性質を持つ副スペクトルをフィボナッチシュタルクラダー (FSL) と呼ぶことにする。フィボナッチ格子に電場をかけた場合のスペクトルはいくつかの FSL の重ね合せになっているのである。

次に各クラスターに含まれる準位の波動関数を調べた。その結果ある一つのクラスターに属する準位の波動関数は全てフィボナッチ格子上の同種の局所構造上に局在し、同じ形をしていることが分かった。Fig. 3.28 に各クラスターに属する準位の波動関数 (振幅の絶対値) の形とそれが局在するフィボナッチ格子上の局所構造を示した。局所構造を示す A と B は、それぞれ変調ポテンシャルの値が 0 と  $V$  の格子点を表わしている。







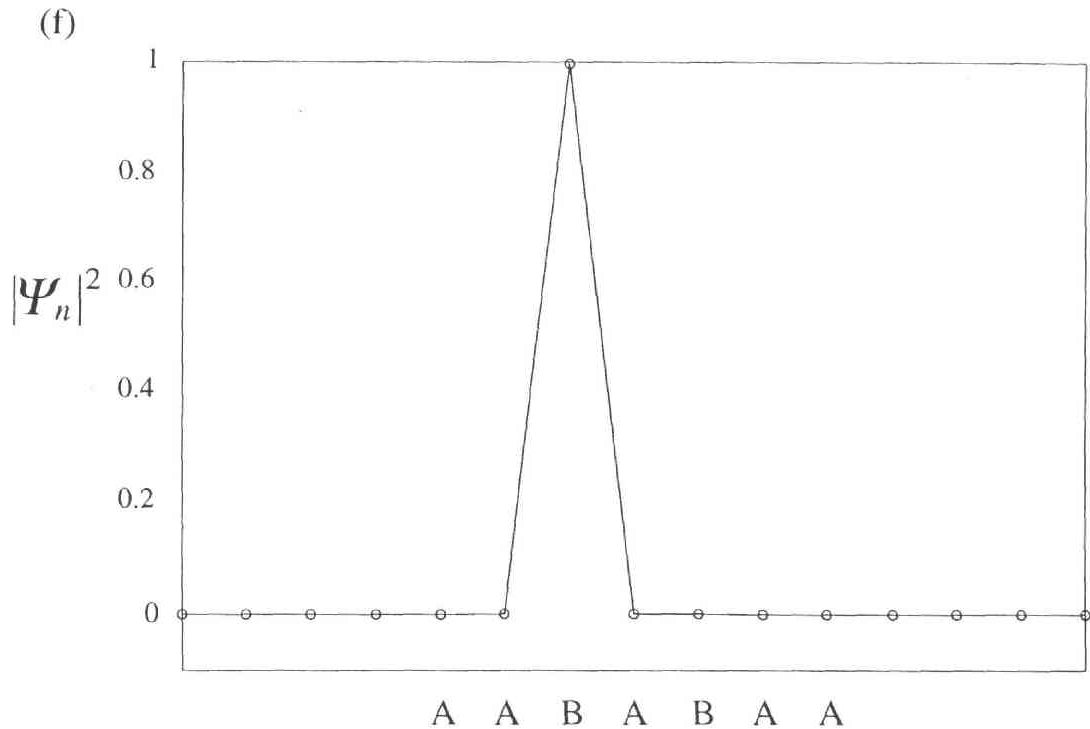


Fig. 3. 28 各クラスターに属する波動関数

同じクラスターに属する準位に対応する波動関数は全て同じ局所構造上に同じ形で局在している。各クラスターの波動関数の形をその局在する局所構造と共に示した。局所構造を示す A と B は、それぞれ変調ポテンシャルが 0 と  $V$  の格子点を表わしている。また、図の名称 (a) から (f) はクラスターの名称 (a から f) と対応している。

さらに、一つのクラスターに属する波動関数を全て抜き出して見るとその空間的並びはフィボナッチ配列となっていることが分かった。Fig. 3. 29 にクラスター b に属する準位の波動関数のうち、格子点番号で 430 から 500 までの範囲に局在するものを示した。この場合には波動関数の間隔を決める二つの隣り合うフィボナッチ数は 8 と 13 であり、この 8 と 13 の並びはフィボナッチ列となっている。

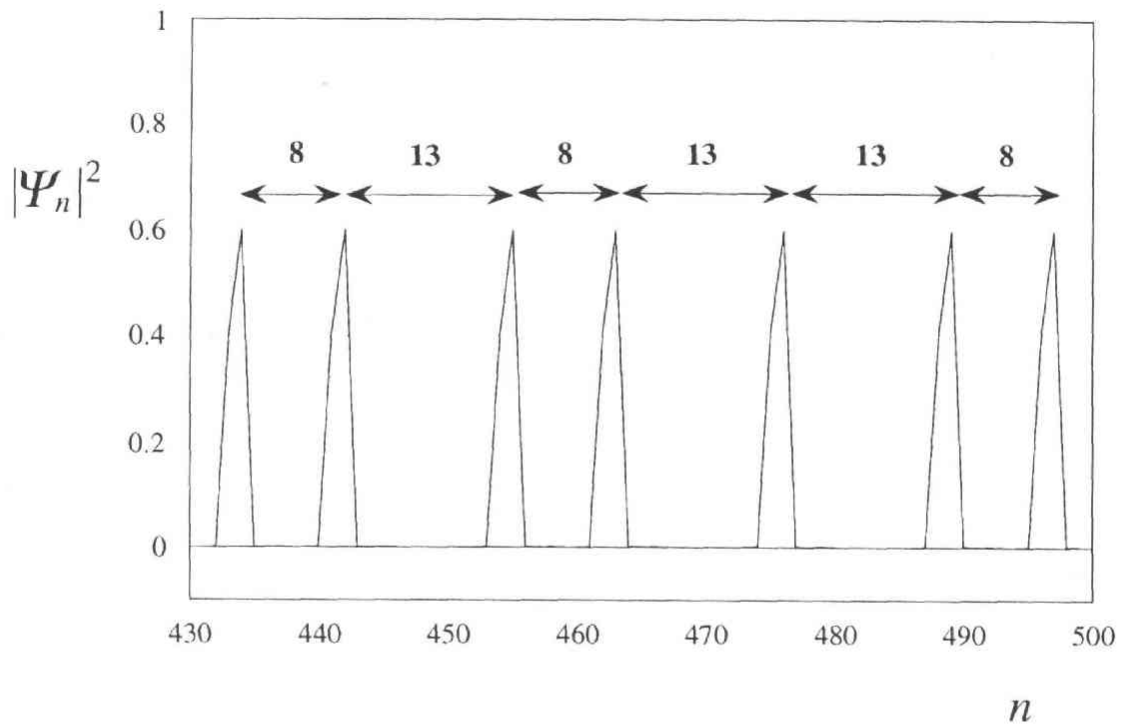


Fig. 3.29 同じクラスターに属する波動関数のフィボナッチ格子上の分布  
図はクラスター b に属する波動関数のうち格子点 430 から 500 までの間にあるものを示した。波動関数の並びはフィボナッチ配列となっている。

一様電場下のフィボナッチ格子のこのような性質は、電場による波動関数の局在とフィボナッチ格子の構造上の特徴である精密化された Conway の定理によって説明できる。

フィボナッチ格子に電場をかけた場合に、そのパラメータに応じた局在長が決まり波動関数は局在する。この波動関数の局在した局所構造と同種の局所構造にはやはり同じ形の波動関数が局在する。同じ形で、同種の局所構造に局在する波動関数のエネルギーは、各々が局在する場所におけるバイアスポテンシャルの差だけ異なる。精密化された Conway の定理で示されるようにフィボナッチ格子上の同種の局所構造の並びはフィボナッチ配列となる。したがって、エネルギー準位間隔は FSL となるのである。

このような物理的描像は RES を導入する際に期待したものであり、RES に



よる解析を実際に行うことによって裏付けされた。RES による解析はこのような物理的描像を反映した方法であり、フィボナッチ格子のシュタルクラダーを理解する上で非常に有効な手法であることが分かった。

フィボナッチ格子のシュタルクラダーはいくつかの FSL の重ね合せである。各 FSL は同種の局所構造上に局在した波動関数が精密化された Conway の定理に従ってフィボナッチ格子上でフィボナッチ配列をなすことによって得られるものである。このような結果は、本研究で導入した RES による解析によって明らかにされた。

## 第 4 章 結論

ここでは、本研究によって得られた結果と今後の展望を述べる。

### 4-1 本研究の結果

本研究では準周期系に一樣電場をかけた系の電子状態について研究を行った。これまでの研究では、ランダム系と準周期系を区別するような性質の発見はなされていなかった。本研究を通して、準周期系に特有の規則と多彩な振る舞いを明らかにすることができた。以下に得られた結果についてまとめる。

#### (1) 準周期系一般について

一樣電場下の準周期系のエネルギースペクトルは平均間隔  $F$  の準周期的シュタルクラダーとなる。これは準位間隔の平均からの変調を表わす変調関数  $g(x)$  によって特徴付けられる。また、この準周期的変調の周期は変調ポテンシャルの周期と同じである。ランダム系ではこのような変調関数は定義できないので、本研究による変調関数  $g(x)$  の発見によって初めてランダム系と準周期系を区別することができた。

エネルギースペクトルは  $\phi$  vs.  $E$  平面上で 2 次元の周期的なパターンを描く。これを 2 次元ワニエシュタルクラダー (2DWSL) と命名した。エネルギースペクトルは 2DWSL の位相を固定した一つの断面である。準周期的シュタルクラダーは 2DWSL の 2 次元の周期とエネルギー軸との非整合性として現われる。2DWSL のような高次の規則性は準周期系特有の性質であると言える。

また、ハミルトニアンの解析的な性質から一つの準位の位相依存性が分かれ

ばその平行移動によって 2DWSL が求められることが分かった。さらに、その位相依存性を表す関数は変調関数  $g(x)$  そのものであることが判明した。

## (2) ハーパーモデルについて

ハーパーモデルにおける変調ポテンシャルの反転対称性から、2DWSL にはユニットセルあたり四つの反転対称中心があることが分かった。

また、変調ポテンシャルの振幅  $V$  が  $V < 1$  を満たすときは周期系と似たような解釈が可能となる。このとき 2DWSL の構造はエネルギースペクトルのミニバンド構造によって説明できる。また、2DWSL はトンネル効果や共鳴効果によって複雑に変化する。これらの性質の大部分は解析的な考察によっても裏付けされた。

電場がないときには  $V = 1$  の臨界点でエネルギースペクトルの自己相似性があったが、これは電場がかけられることによって壊される。しかし、電場も適当にスケールする事によって相似な 2DWSL を見つけることができる。このとき、系を特徴付ける量は実効格子定数と波動関数の局在長の比であることが確かめられた。

$V > 1$  のときは、波動関数の重心の大きさの順による番号付けが系の性質の理解の助けとなった。この領域では、各格子点に局在した状態を非摂動状態とした摂動論によって理解できる。

## (3) フィボナッチ格子について

フィボナッチ格子の場合には、ハーパーモデルとは非常に異なった性質を示すことが分かった。

エネルギーの位相依存性は有限個の不連続点を持つ区分的定数関数となり、その不連続点の  $\phi$  の値は二つの整数  $m, n$  を用いて  $\phi = n - m\omega$  と表わすことができる。この不連続点の位相はフィボナッチ格子の変調ポテンシャルの構造によっておおよそ理解が可能であった。しかし、不連続点での位相とギャップの大きさとの関係はまだ解明されていない。

フィボナッチ格子のシュタルクラダーを解析する上でより有効な方法を発見

した。この解析方法はフィボナッチ格子上の似たような環境には似たような状態が局在し、それらの間のエネルギー準位の差はバイアスポテンシャルの分だけになるという考え方をもとにしたものである。このような考え方に従うと、各エネルギー準位から電場の整数倍を差し引いた値がその準位を特徴付けることが分かる。この値を還元エネルギースペクトル (RES) と命名した。

RES は階層的なクラスター構造を持ち、各クラスターの重率が黄金比のべき乗である。また、容量次元を解析したところ RES が skinny fractal であることが判明した。skinny fractal が物理に現われたのはこの RES が初めてのことであり、本研究の重要な成果である。

RES が skinny fractal であることを利用して、エネルギースペクトルを有限個の副スペクトルに分けたところ、全ての副スペクトルはフィボナッチシュタルクラダー (FSL) となることが分かった。FSL とは間隔が2種類しかなく、その大きさは隣り合う二つのフィボナッチ数倍の電場の大きさで、その並びはフィボナッチ列をなすようなスペクトルである。フィボナッチ格子のシュタルクラダーはいくつかの FSL の重ね合せであることが明らかにされた。

また、RES の同じクラスターに属する状態の波動関数は全て同じ形であり、フィボナッチ格子上の同じ局所構造上に局在している。これらは、本研究で精密化された Conway の定理にしたがってフィボナッチ配列をなしてフィボナッチ格子上に分布する。

一様電場下のフィボナッチ格子のこのような性質は、電場によって波動関数が局在することと本研究で精密化された Conway の定理によって説明される。その結果 RES による解析がこのような物理的描像を反映した有効な手段であることが分かった。

本研究によって1次元準周期系の二つの典型 (ハーバーモデルとフィボナッチ格子) のシュタルクラダーの基礎となる性質はほぼ理解できたと考えてよい。

#### (4) シュタルクラダー以外の結果

一様電場下の準周期系の研究の過程でいくつかの副次的な成果があげられた。それらについてここでまとめておく。

まず、広義の fractal の分類において skinny fractal という概念を定義し命名した。

電場がない場合のハーパーモデルの局在領域では、重心の順による番号付けが系の性質の整理に有効であり、簡単な摂動論によってエネルギースペクトルの性質が理解できることを明らかにした。このような解析の手法は本研究によって初めてなされたことである。

また、Conway の定理を精密化することによって、フィボナッチ格子の構造の特徴を詳しく記述することができた。

#### 4-2 今後の課題

ここでは今後の研究の展開として考えられることをいくつか述べる。

まず、フィボナッチ格子の場合の準位の位相依存性の解明と RES のパラメタ依存性を詳しく調べることを考えている。これにより一様電場下のフィボナッチ格子の性質をより詳しい解析を行う。

また、本研究による基礎理論を発展させると共にいくつかの応用も考えられる。

準周期系の一つの典型であるハーパーモデルは 2 次元長方格子に磁場をかけることによって実現される。このような系に電場をかけた場合のシュタルクラダーについては本研究によって明らかにされた。これに対して、系が三角格子になった場合には、ハーパーモデルとはまた異なった複雑な振る舞いをする事が期待される。このような正方格子と三角格子における物性の違いはアンチドット系における量子輸送現象などにもみられることで大変興味深い。

また、2 次元準周期系の典型であるペンローズ格子における一様電場の影響を調べることも考えられる。このモデルは実際の 2 次元準結晶のモデルとして考えられているものである。

このような系を扱うことによって 2 次元系でのシュタルクラダーの理解を深めることが必要である。

また、本研究の成果を現実の系への応用という形で実現することも考えたい。

そのためには、実験的に測定される適当な物性値を計算する必要がある。今のところフィボナッチ列を用いた準周期超格子における光吸収スペクトルが考えられる。現在、半導体周期超格子におけるシュタルクラダーの観測は光吸収スペクトルによって行われている。また準周期超格子としてフィボナッチ超格子の作成が行われ、その構造や物性の測定も行われるようになった<sup>16)</sup>。本研究のフィボナッチ格子のシュタルクラダーの研究が光吸収スペクトルの計算においても生かされることになるであろう。

現実の半導体超格子では量子効果を利用したさまざまなデバイスが考案されている。その中に、ラテラル超格子という新しい超格子がある。これは、半導体ヘテロ界面に閉じ込めた電子を、さらに表面構造を制御することにより、界面に平行な方向に周期ポテンシャルを誘起させたものである。この周期ポテンシャルによって電子の閉じ込めがおこり量子細線が実現する。この周期ポテンシャルの強さは制御用の電極にバイアス電圧を印加することによって調節できるためこの系は外部から制御が可能である。また、このような構造によって誘起される周期ポテンシャルは連続的なカーブを描く。このような特徴を持つラテラル超格子は新しい光デバイスへの応用が開ける重要な構造であると考えられている。

この表面の超格子を周期的ではなく準周期的、例えばフィボナッチ列にすることによって準周期ラテラル超格子が作成可能である。このような超格子の性質は通常のラテラル超格子とは大きく異なった複雑な性質を示すものと期待される。また、フィボナッチ的性質とともにポテンシャルが連続的であることからハーバーモデル的な性質も期待できる。このような系の光吸収の計算と、さらに一様電場をかけた場合のスペクトルの変化について調べる。これらの研究によって準周期ラテラル超格子の新しいデバイスへの可能性を探ることも今後の課題として考えている。

この分野の研究は、このように電子の局在化、フラクタル、メゾスコピック系といった最近の物性物理の重要な問題と深いつながりがあり、基礎、応用ともに大きな成果が上がる可能性のある分野といえる。したがってこのような多彩さを念頭に置いた研究がこれから望まれる。

## 謝 辞

本研究を行うにあたって最後まで暖かく見守って下さった方々にここに感謝の意を表したいと思います。

特に大学院生活5年間にわたり指導して下さいました新関駒二郎教授には大変感謝いたします。このような研究が行えたのも新関駒二郎教授のアドバイスあつてのことです。

安原洋教授には主査を引き受けていただいたうえ、至らない私をいつも励まし勇気付けて下さり、公私ともども大変お世話になりました。本当に感謝いたします。

また、酒井治助教授、齋官清四郎教授、小川哲生助教授には予備審査の段階から大変お世話になりました。内容の吟味とともにプレゼンテーションの仕方に至るまで親身な指導をしていただき、大変感謝しています。

中島龍也博士にもまた、アドバイスと共に準備のお手伝いまでしていただき大変助かりました。ありがとうございました。

さて、いろいろな人との出会いが学生生活をととても有意義なものにしてくれました。

まず、物性理論研究室のスタッフの方々、学生の皆さんにも感謝の意を表したいと思います。秘書の山形美香さんと熊谷恵美さんには予備審査の準備や片付けを手伝っていただきました。また、日頃から様々な面でお世話になりました。高山立博士には良き先輩としていろいろな面でアドバイスをいただきました。また、製本所の紹介もしていただきました。同室の八木栄后君にはコンピュータ関係の相談にのってもらうことが多々ありました。特に、この研究の計算で用いた3重対角行列の固有値を求めるライブラリーは八木君作のもの

で、性能がよく研究がはかどりました。また、論文を製本所まで運んでくれました。岩沢正樹君、藤田伸尚君は日頃から議論や雑談に付き合ってくれました。ただ、二人の修士論文の進行に悪影響を与えたことについてここでお詫びします。

それからミクロ構造物理研究室の皆さんにもお礼を述べたいと思います。いろいろな人達が出入りしてとても面白いところでした。そんな研究室の仲間に入れてもらえたことにとても感謝しています。寺崎治助教授と野末泰夫博士には研究面にとどまらず、いろいろな面での援助やアドバイスをいただきとても勉強になりました。また、辛い毎日が続いたときに学生の皆さんの暖かい雰囲気は何度となく助けられました。阪本康弘君と中原千波さんが修士論文を頑張る姿には励まされました。それから、秘書の早坂理恵さんの話を聞くと元気が出たものです。皆さん、どうもありがとうございました。

野沢百合さんには日頃からいろいろな面でお世話になり感謝しています。最後の校正にも付き合ってくれました。本当にありがとうございました。

また、博士課程の3年間を日本学術振興会に援助していただいたことは非常に幸運でした。慎んでお礼を申し上げます。

最後に私のわがママを黙って見守り、いつも陰ながら支えてくれていた両親に感謝したいと思います。



## 参考文献

- 1) Optical properties of low-dimensional materials, ed. T. Ogawa and Y. Kanemitsu (World Scientific, 1995). Chap.3 "Wannier-Stark localization states in semiconductor superlattices and references therein.
- 2) F.Bloch, Z. Phys. **52** (1928) 555.
- 3) S.Katsura, T.Hatta, and A.Morita, Sci. Rep. Tohoku Imp. Univ., Ser.I, **34** (1950) 19.
- 4) H.M.James, Phys. Rev. **76** (1949) 1602.
- 5) P.Feuer, Phys. Rev. **88** (1952) 92.
- 6) G.H.Wannier, in Elements of Solid State Theory (New York : Cambridge University Press, 1959) pp 190 ; G.H.Wannier, Rev. Mod. Phys. **34** (1962) 645.
- 7) G.Nenciu, Rev. Mod. Phys. **63** (1991) 91 and references therein.
- 8) S.Maekawa, Phys. Rev. Lett. **24** (1970) 1175.
- 9) L.Esaki and R.Tsu, IBM J. Res. Dev. **14** (1970) 61.
- 10) E.E.Mendez, F.Agulló-Rueda, and J.M.Hong, Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 2426 ; E.E.Mendez, Proceedings of the Twentieth International Conference on the Physics of Semeconductors (World Scientific, Singapore, 1992) 1206 and references therein.
- 11) D.Shechtman, I.Blech, D.Gratias and J.W.Cahn, Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 1951.
- 12) U.Mizutani, A.Kamiya, T.Matsuda, S.Takeuchi, Mater. Sci. Eng. **A133** (1990) 111.
- 13) 本田 祐子, 枝川 圭一, 吉岡 明紀, 橋本 辰男, 竹内 伸, 第2回準結晶研究会. 1993年12月13日-15日. 於つくば.
- 14) K.Kimura, K.Kishi, T.Shibuya, T.Hashimoto and S.Takeuchi, Mater. Sci. Eng. **A133** (1991) 94 ; U.Mizutani, Y.Sakabe, T.Shibuya, K.Kishi, K.Kimura and S.Takeuchi, J. Phys. : Condens. Matter **2** (1990) 6169.
- 15) J.B.Sokoloff, Phys. Rep. **126** (1985) 189 ; H.Hiramoto and M.Kohmoto, Int. J.

- Mod. Phys. **6** (1992) 281 ; M.Kohmoto, L.P.Kadanoff and C.Tang, Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 1870.
- 16) H.Terauchi, Y.Noda, K.Kamigaki, S.Matsunaka, M.Nakayama, H.Kato, N.Sano and Y.Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. **57** (1988) 2416 ; R.Merlin, K.Bajema, R.Clarke, F.Y.Juang and P.K.Bhattacharya, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 1768.
  - 17) M.Luban, J.H.Luscombe, Phys. Rev. B **34** (1986) 3674.
  - 18) J.F.Weisz and C.Slutsky, Phys. Rev. B **34** (1986) 4162.
  - 19) P.G.Harper, Proc. Phys. Soc. Lond. A **68** (1995) 874 ; 879.
  - 20) S.Aubry and G.Andre, Ann. Isr. Phys. Soc. **3** (1980) 133.
  - 21) 高木貞治, 初等整数論講義 (共立出版, 1931) .
  - 22) M.Fujita and K.Machida, J. Phys. Soc. Jpn. **56** (1987) 1470.
  - 23) J.Bellissard, A.Bovier and J.M.Ghez, Rev. Math. Phys. **4** (1992) 1 ; F.H.Claro and G.H.Wannier, Phys. Rev. B **19** (1979) 6068.
  - 24) F.Wijnands, J. Phys. A : Math. Gen. **22** (1989) 3267.
  - 25) M.Gardner, Sci. Am. **236** (1977) 110.
  - 26) For review, see H.Hiramoto and M. Kohmoto, Int. J. Mod. Phys. **6** (1992) 281.
  - 27) Q.Niu, Phys Rev. B **40** (1989) 3635.
  - 28) K.Miizeki and A.Matsumura, Phys. Rev. **B** (1993) 4126.
  - 29) P.N.Argyres, Phys. Rev. **126** (1962) 1386.
  - 30) A.Matsumura and K.Niizeki, Proceedings of the 5th International Conference on Quasicrystals (World Scientific, Singapore, 1995) 92.